

803206165

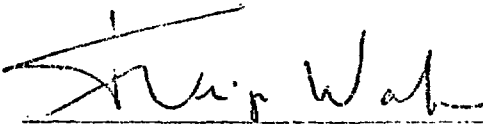
1N1-mt--7373

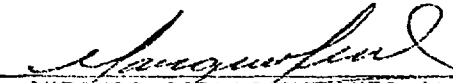
AVALIAÇÃO DE ALGORITMOS DE
SÍNTESE DE FLUXO

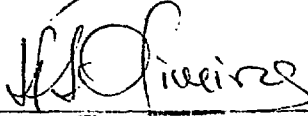
Leila Jorge Antunes

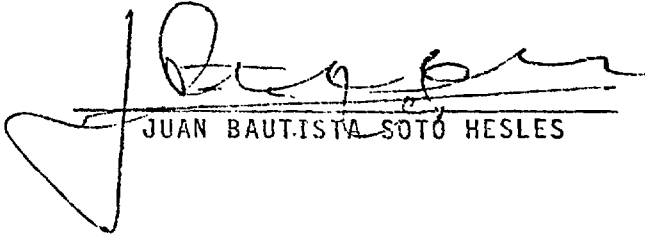
TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS PROGRA-
MAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE FEDERAL
DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PA-
RA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS (M.Sc.).

Aprovada por:


FERNANDO DA VEIGA WATSON
(Presidente)


ANTONIO CARLOS MARQUES ALVIM


LUIZ FERNANDO SEIXAS DE OLIVEIRA


JUAN BAUTISTA SOTO HESLES

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

ABRIL DE 1981

ANTUNES, LEILA JORGE

Avaliação de Algoritmos de Síntese de Fluxo
(Rio de Janeiro) 1981.

VII, 151p. 29,7 cm (COPPE-UFRJ, M.Sc,
Engenharia Nuclear, 1981)

Tese - Univ. Fed. Rio de Janeiro. Programa
de Engenharia Nuclear

1. Física de Reatores. 2. Equação de Difusão.
3. Síntese . I.COPPE/UFRJ II. Título (série).

A

Antonio Carlos e Vera.

AGRADECIMENTOS

Ao Dr. FERNANDO DA VEIGA WATSON, pela orientação segura e pela amizade.

Ao Dr. JUAN BAUTISTA SOTO HESLES, pelo apoio e incentivo recebidos desde o meu ingresso na COPPE.

Aos Drs. LUIZ FERNANDO SEIXAS DE OLIVEIRA e ANTONIO CARLOS MARQUES ALVIN, membros da Banca, pela sua participação.

Ao colega PAULO PARENTE PESSOA, pela elaboração do programa que permitiu o uso do "plotter" na feitura dos gráficos.

A RENATA GOMES JORGE, pelas figuras, e a IRANEI DE DE CASTRO OLIVEIRA, pela dedicação na datilografia.

Aos professores e funcionários da COPPE, pela cooperação recebida, e a todos os colegas pela amizade.

Finalmente, a ANTONIO CARLOS BAPTISTA ANTUNES, pelo apoio irrestrito durante toda a execução deste trabalho.

RESUMO

Determinou-se ~~o objetivo deste trabalho é a determinação do~~
algoritmo de síntese de fluxo mais adequado à resolução numérica de problemas de multigrupo-difusão. Para isto foram estudados três tipos de síntese:

- 1) síntese descontínua
- 2) síntese contínua
- 3) síntese pseudo-contínua

Para os dois primeiros tipos de síntese foram elaborados algoritmos em duas formulações: diferencial e matricial. Para síntese pseudo-contínua somente a formulação matricial foi utilizada.

Os resultados obtidos nos testes efetuados permitem estabelecer a seguinte ordem de eficiência para estes algoritmos:

- 1) síntese contínua (formulação matricial)
- 2) síntese contínua (formulação diferencial)
- 3) síntese pseudo-contínua
- 4) síntese descontínua (formulação matricial)
- 5) síntese descontínua (formulação diferencial).

(autor)

ABSTRACT

~~The main goal of this work is the determination~~
of the flux synthesis algorithm which is the best fit to the numerical solution of the multigroup diffusion equations, ^{was determined.} Three different types of synthesis were studied:

- 1) discontinuous synthesis,
- 2) continuous synthesis,
- 3) pseudo-continuous synthesis.

A matrix and a differential formulation were developed for the first two types of synthesis. For pseudo-continuous synthesis only the matrix formulation was used.

Some tests were performed and the results allowed us to establish the following order of efficiency for the algorithms:

- 1) continuous synthesis (matrix formulation)
 - 2) continuous synthesis (differential formulation)
 - 3) pseudo-continuous synthesis
 - 4) discontinuous synthesis (matrix formulation)
 - 5) discontinuous synthesis (differential formulation)
- (author)

INDICE

CAPÍTULO I	01
I.1 - Introdução	01
I.2 - Método de Síntese	03
I.2.1 - Síntese Descontínua	04
I.2.2 - Síntese Contínua	04
I.2.3 - Síntese Pseudo-Contínua	06
 CAPÍTULO II - FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DOS TIPOS DE SÍNTESE PARA UM GRUPO E DUAS DIMENSÕES	 09
II.1 - Síntese Descontínua	10
II.2 - Síntese Contínua	19
II.3 - Síntese Pseudo-Contínua	32
 CAPÍTULO III - RESOLUÇÃO NUMÉRICA DAS EQUAÇÕES OBTIDAS ATRAVÉS DO USO DO MÉTODO DE SÍNTESE E DESCRIÇÃO DOS PRO GRAMAS ELABORADOS	 42
III.1 - Método da Potência	42
III.2a - Método de Eliminação de Gauss	46
III.2.b - Extensão do Método de Eliminação de Gauss para Matrizes Quase-Tridiagonais.	47
III.3 - Descrição dos Programas Elaborados	49
 CAPÍTULO IV - RESULTADOS E CONCLUSÕES	 53
IV.1 - Resultados	53
IV.1.1 - Teste da Acurácia dos Programas de Síntese	 53

IV.1.2 - Teste da Influência da Constante de Normalização das Funções-Teste no Cálculo do Autovalor	54
IV.1.3 - Teste de Convergência para Síntese Contínua	54
IV.1.4 - Variação nas Dimensões dos Códigos da Síntese Pseudo-Contínua..	57
IV.2 - Conclusões	58
BIBLIOGRAFIA	61
APÊNDICE A - DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO POR DIFERENÇAS FINITAS - CENTRO DE MALHA	64
A.1 - Um Grupo, Uma Dimensão	64
A.2 - Um Grupo, Duas Dimensões	76
APÊNDICE B - MÉTODO VARIACIONAL PARA OBTENÇÃO DAS EQUAÇÕES DE SÍNTESE CONTÍNUA	85
APÊNDICE C - TABELAS E GRÁFICOS	92
APÊNDICE D - PROGRAMAS	114

CAPÍTULO 1

1.1 - Introdução

O método que apresenta resultados mais acurados para as equações de multigrupo-difusão a três dimensões é o método de diferenças finitas. No entanto, cálculos rotineiros a três dimensões por diferenças finitas são impraticáveis devido ao grande consumo de tempo e memória de computador que este método requer. Mesmo a duas dimensões há o problema do tempo de computação necessário à execução de cálculos repetitivos, como por exemplo a otimização do núcleo de um reator.

Estas restrições ao método de diferenças finitas estimularam a pesquisa de métodos alternativos, tais como elementos finitos, método nodal e matriz-resposta.

O método de elementos finitos⁽¹⁾ tem como base a divisão do reator em nodos, dentro dos quais o fluxo é aproximado por expansões polinomiais, cuja substituição na equação de difusão leva a um conjunto de equações algébricas para os coeficientes dos polinômios. Configurações muito heterogêneas ou o uso de polinômios de ordem alta conduzem a equações cuja solução numérica é difícil e demorada.

O método nodal⁽¹⁾ utiliza relações simples entre o fluxo médio em um nodo e as correntes nas interfaces dos nodos. O método é econômico em termos de computação por ser um método de malha grossa, mas sua desvantagem é a falta

de uma descrição detalhada do fluxo neutrônico no interior dos nodos, além de ter baixa precisão. Variações deste método que permitem melhor descrição do fluxo dentro dos nodos acarretam efeitos não lineares na solução iterativa, prejudicando a convergência.

Matriz-resposta⁽²⁾ é um método que funciona bem a duas dimensões, tendo precisão razoável com pequenos tempos de computação. Sua utilização em modelos a três dimensões é difícil pois o número de nodos adjacentes aumenta em relação ao de duas dimensões, aumentando portanto o esforço de cálculo para relacionar um nodo aos nodos contíguos. Para problemas muito heterogêneos sua solução não é econômica.

Um método que tem apresentado bons resultados a três dimensões é o método de síntese, que permite que soluções a uma e duas dimensões sejam acopladas de modo a reduzir bastante o tempo total de computação. Sua precisão é boa, sendo possível o uso de códigos de diferenças finitas para a solução a duas dimensões.

Vários códigos de síntese já estão disponíveis, entre eles o SYNTRON⁽³⁾ e KASY⁽⁴⁾.

Três códigos de síntese espacial foram desenvolvidos na COPPE até o presente momento, um deles com algoritmo de síntese descontínua⁽⁵⁾, e dois usando síntese pseudo-contínua^(6,7). Os resultados obtidos por estes códigos comprovam as vantagens do método de síntese.

Uma decorrência natural da pesquisa em síntese na COPPE é o presente trabalho, cujo tema é um estudo comparativo dos métodos de síntese atualmente em uso.

1.2 - Método de Síntese

Embora os modelos de reatores sejam heterogêneos, observa-se que quase sempre há uma direção na qual esta heterogeneidade é menos acentuada, como, por exemplo, a direção paralela aos elementos combustíveis, na qual a variação do fluxo de nêutrons é relativamente lenta. Desta observação surgiu a idéia da aproximação de síntese, que, apesar de não dispor de sólidas bases teóricas, tem sido bastante usada devido aos resultados que fornece.

A hipótese básica do método de síntese é a separabilidade do fluxo por região axial do reator. Tal separabilidade permite que sejam calculadas soluções para a equação de difusão a três dimensões pela combinação de soluções a duas dimensões para a região transversal e a uma dimensão para a região axial, exigindo menor gasto de computação do que a solução direta a três dimensões.

No caso de um problema realmente separável, isto é, um problema para o qual não haja variação nos parâmetros materiais ao longo de uma direção, o método de síntese corresponde à solução exata.

Existem essencialmente três tipos de aproxima

ções de síntese, caracterizadas por diferentes formas para o fluxo de nêutrons.

1.2.1 - Síntese Descontínua⁽⁸⁾

Para um modelo de reator a três dimensões, dividido em N regiões materiais na direção axial, o fluxo para cada região é representado por

$$\phi^j(x,y,z) = H^j(x,y) Z^j(z), \quad j=1,N$$

onde $Z^j(z)$ é função na direção axial, a ser calculada, e $H^j(x,y)$ é função-teste na direção transversal, previamente calculada, ambas para a região axial j.

O fato de que cada função-teste $H^j(x,y)$ é utilizada somente em uma região axial j causa descontinuidades na função axial $Z(z)$, e, portanto, no fluxo total para o reator, sendo esta a principal limitação deste tipo de síntese.

A questão da determinação das funções-teste é fundamental, uma vez que a função axial calculada depende diretamente da função-teste utilizada para cada região.

1.2.2 - Síntese Contínua

A síntese contínua foi proposta em 1962 por

Kaplan⁽⁹⁾, a partir da idéia da síntese descontínua, com o propósito de eliminar o problema da descontinuidade da função axial nas interfaces das regiões. O fluxo para este tipo de síntese tem a forma

$$\Phi(x,y,z) = \sum_{j=1}^N H^j(x,y) Z^j(z)$$

onde $H^j(x,y)$ é a mesma função-teste utilizada na síntese descontínua para a região j , mas que para síntese contínua será válida para todo o reator, e as funções Z^1, \dots, Z^N são funções axiais que se estendem também a todo o reator.

Esta combinação linear de funções fornece uma descrição mais acurada para o fluxo mas introduz problemas que não aparecem para o modelo mais simples da síntese descontínua.

Um destes problemas é a possível singularidade das matrizes da equação a ser obtida para a função axial, que pode ser causada pela dependência linear das funções-teste empregadas. Mesmo que as funções-teste não sejam linearmente dependentes, se forem muito semelhantes podem gerar mau condicionamento nas matrizes da equação para a função axial, levando a soluções incorretas.

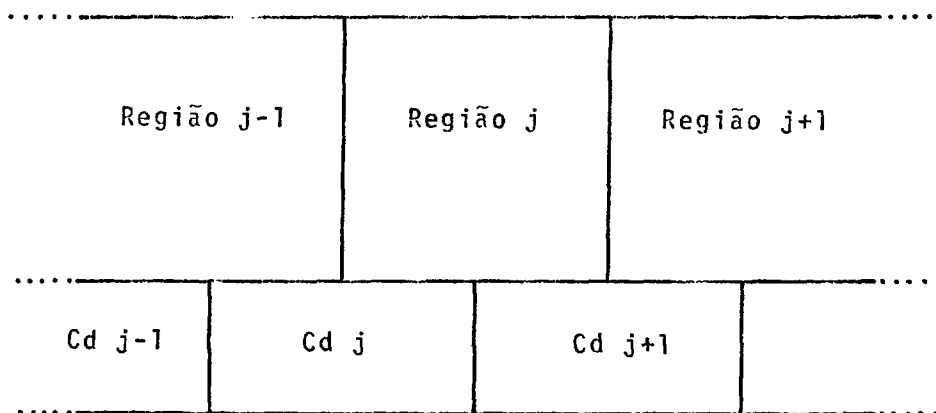
Além disso, as equações obtidas através deste método não preservam a forma de equações de multigrupo-difusão, impossibilitando a sua solução pelos códigos de difusão usuais.

Outro problema a ser considerado é o da determinação das funções-teste, que não é consistente com este tipo de síntese. De fato, para o cálculo destas funções-teste é feita uma síntese descontínua, na qual as funções axiais por região são previamente estimadas, e as incógnitas são as funções em x, y .

1.2.3 - Síntese Pseudo-Contínua⁽¹⁰⁾

Neste tipo de síntese o reator com N regiões é dividido em $N+1$ codomínios axiais (ver Figura I.1), de modo que a interface de duas regiões fique localizada no interior do codomínio correspondente, evitando-se assim fortes variações materiais nas interfaces dos codomínios.

Figura I.1 - Divisão em Codomínios



O fluxo no interior de cada codomínio é descrito por uma combinação das funções-teste das regiões componentes de cada codomínio, e uma função na variável axial.

Esta combinação é feita com o auxílio de funções axiais, chamadas funções-mistura, que dão a influência dos parâmetros materiais de cada região componente no fluxo total para o codomínio.

Assim, o fluxo para cada codomínio pode ser escrito como

$$\Phi^j(x,y,z) = \Psi^j(x,y,z) Z^j(z)$$

sendo

$$\Psi^j(x,y,z) = H^{j-1}(x,y) \alpha^{j-1}(z) + H^j(x,y) \alpha^j(z)$$

e

$H^{j-1}(x,y)$ - função-teste na direção transversal para região $j-1$

$H^j(x,y)$ - função-teste na direção transversal para região j

$\alpha^{j-1}(z)$ - função-mistura na direção axial para região $j-1$

$\alpha^j(z)$ - função-mistura na direção axial para região j

A síntese pseudo-contínua tem sobre a descontínua a vantagem de eliminar as discontinuidades do fluxo nas interfaces das regiões, sendo ao mesmo tempo menos complexa do que a contínua, e consequentemente exigindo menos tempo e memória de computador, além de eliminar também qualquer pos-

sível mau condicionamento do problema a uma dimensão. Por outro lado, a determinação das funções-mistura não é sistematizada, mas simplesmente uma questão de experiência, o que dificulta o uso deste método.

Outro detalhe a merecer atenção na síntese pseudo-contínua é relativo ao cálculo de parâmetros materiais ponderados para cada codomínio: como as funções-mistura são contínuas na variável axial, os parâmetros ponderados para cada codomínio também o são, o que é incompatível com a solução numérica do problema, que é feita com valores discretos. Logo, é preciso que sejam calculados parâmetros médios descontínuos por malha na direção axial, tendo-se portanto um cálculo equivalente a uma síntese descontínua por malha.

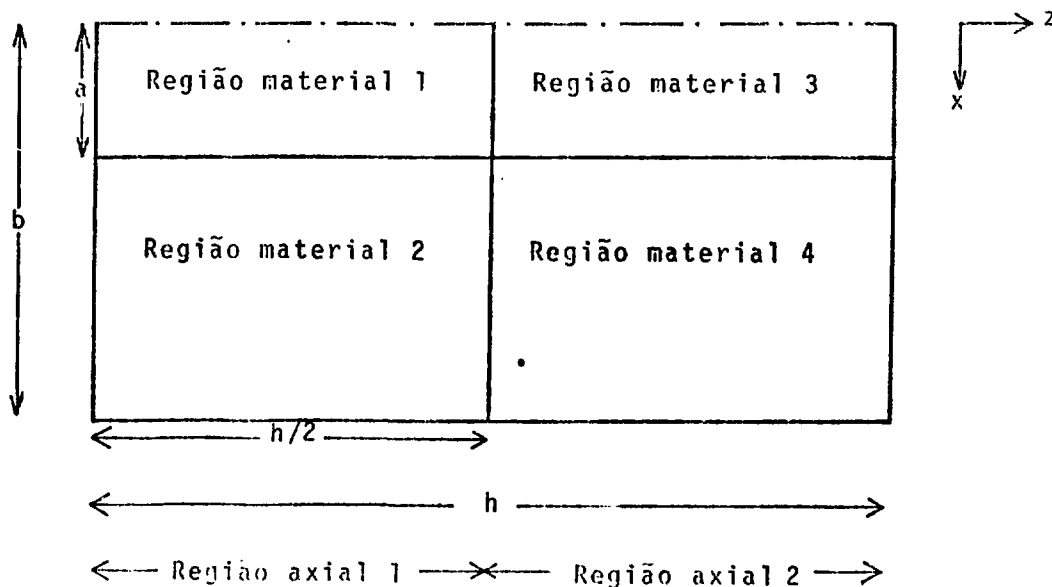
CAPÍTULO II

FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DOS TIPOS DE SÍNTESE PARA UM GRUPO E DUAS DIMENSÕES

Para levar a efeito o estudo comparativo dos tipos de síntese anteriormente descritos foi necessário escolher um problema padronizado que encerrasse as dificuldades inerentes a um problema a três dimensões, como a não separabilidade do fluxo de nêutrons, mas que pudesse ser empregado várias vezes, aceitando um certo número de variações.

Foi então elaborado um modelo de reator a duas dimensões, sem refletor, dividido em quatro regiões materiais e dotado de simetria no eixo $x = 0$ (Ver Figura II.1).

Figura II.1 - Divisão do Reator em Regiões



O fato de o modelo ser a duas dimensões permitiu o uso repetido de um código de diferenças finitas para a geração das funções-teste para a síntese, o qual ao mesmo tempo forneceu soluções "exatas" utilizadas na avaliação da acurácia dos resultados obtidos através dos diferentes algoritmos de síntese.

O uso de um único grupo de energia nos cálculos proporcionou economia de tempo e memória de computador, sem que fosse eliminada qualquer característica importante do problema, pois eventuais falhas do método de síntese seriam independentes do número de grupos utilizado.

A formulação matemática foi desenvolvida tendo em vista a aplicação neste modelo, mas a extensão a um maior número de regiões materiais ou grupos de energia não apresenta dificuldades.

11.1 - Síntese Descontínua

a) Formulação Diferencial

Nesta formulação chega-se a uma equação na variável axial tendo como coeficientes parâmetros médios obtidos pelo uso das funções-teste como funções peso (método de Galerkin⁽¹¹⁾), e esta equação é então discretizada por diferenças finitas.

Para o modelo representado na Fig.(II.1) te

mos a equação de difusão a duas dimensões e um grupo de energia

$$-\nabla \cdot D \nabla \phi(x,z) + \Sigma_a \phi(x,z) = \frac{1}{k} \nu \Sigma_f \phi(x,z) \quad (II.1)$$

sujeita às condições de contorno

$$\begin{aligned} \text{i)} \quad & \phi(x,0) = 0, \\ \text{ii)} \quad & \phi(x,h) = 0, \\ \text{iii)} \quad & \nabla_x \phi(0,z) = 0, \\ \text{iv)} \quad & \phi(b,z) = 0, \end{aligned} \quad (II.2)$$

e às condições de fluxo e corrente contínuos nas interfaces das regiões materiais, na qual

$\phi(x,z)$ - é o fluxo de nêutrons,

D - é o coeficiente de difusão de nêutrons,

ν - é o número médio de nêutrons produzidos por fissão, e

Σ_f - é a seção de choque de fissão.

Para o modelo proposto a forma do fluxo neste tipo de síntese é

$$\phi^j(x,z) = H^j(x) Z^j(z), \quad j = 1,2 \quad (II.3)$$

onde as $H^j(x)$ são funções-testes já calculadas, as $Z^j(z)$ são funções axiais a serem determinadas, e j é o índice referente à região axial em questão.

Separando-se o operador ∇ em suas componentes

nas direções x e z e substituindo-se o fluxo dado por (II.3) em (II.1) temos:

$$- \left| \nabla_x \cdot D \nabla_x H^j \right| Z^j - \nabla_z \cdot D H^j \nabla_z Z^j + \Sigma_a H^j Z^j = \frac{1}{k} v \Sigma_f H^j Z^j, \quad j = 1, 2 \quad (II.4)$$

Multiplicando-se cada termo de (II.4) pelas funções $H^1(x)$ (para região axial 1) ou $H^2(x)$ (para região axial 2) e integrando-se na variável x chegamos à equação

$$- \nabla_z \cdot \bar{D}^j \nabla_z Z^j + \left| \bar{\Sigma}_a^j + \bar{\Sigma}_\ell^j \right| Z^j = \frac{1}{k} v \bar{\Sigma}_f^j Z^j, \quad j = 1, 2 \quad (II.5)$$

na qual \bar{D}^j , $\bar{\Sigma}_a^j$, $\bar{\Sigma}_f^j$ e $\bar{\Sigma}_\ell^j$ são parâmetros médios calculados do seguinte modo

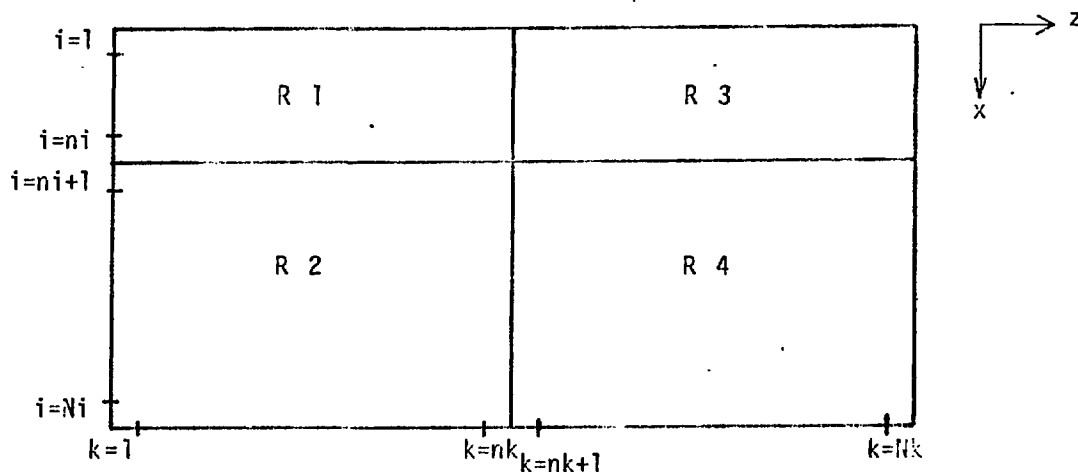
$$\begin{aligned} \bar{D}^j &= (H^j(x), D H^j(x)) \\ \bar{\Sigma}_a^j &= (H^j(x), \Sigma_a H^j(x)) \\ \bar{\Sigma}_f^j &= (H^j(x), v \Sigma_f H^j(x)) \quad \text{e} \\ \bar{\Sigma}_\ell^j &= (H^j(x), - \nabla_x \cdot D \nabla_x H^j(x)) = (\nabla_x H^j(x), D \nabla_x H^j(x)) - \\ &\quad - H^j D \nabla_x H^j \Big|_-^+ \end{aligned} \quad (II.6)$$

onde (\dots) denota integração na variável x e $\Big|_-^+$ os valores do termo no contorno da região axial j. O último termo da equação para $\bar{\Sigma}_\ell^j$ se anula devido às condições de contorno aplicadas à função $H^j(x)$ na região j.

Para que a Equação (II.5) possa ser escrita numa forma adequada à solução numérica, as funções H^j e Z^j e os parâmetros médios devem estar em forma discreta. Logo, deve-se fazer uma divisão do reator em malhas nas direções x e z como

na (Figura II.2),

Figura II.2 - Divisão do Reator em Malhas



onde

Ni - é o número total de malhas na direção x

Nk - é o número total de malhas na direção z

ni e $ni+1$ - malhas contíguas à interface de regiões materiais na direção x ,

nk e $nk+1$ - malhas contíguas à interface de regiões materiais na direção z ,

i - índice de malha na direção x

k - índice de malha na direção z

As funções $H^j(x)$ e $Z^j(x)$ serão então descritas por Ni e Nk componentes respectivamente, cada componente correspondendo ao valor da função tomado no centro da malha.

Podemos então calcular os parâmetros médios por região axial:

$$\begin{aligned}\bar{D}^j &= \sum_{i=1}^{ni} (H_i^j)^2 D_{j'} + \sum_{i=ni+1}^{Ni} (H_i^j)^2 D_{j'+1} \\ \bar{\Sigma}_a^j &= \sum_{i=1}^{ni} (H_i^j)^2 \Sigma_{a_{j'}} + \sum_{i=ni+1}^{Ni} (H_i^j)^2 \Sigma_{a_{j'+1}} \\ \bar{\nu \Sigma}_f^j &= \sum_{i=1}^{ni} (H_i^j)^2 \nu \Sigma_{f_{j'}} + \sum_{i=ni+1}^{Ni} (H_i^j)^2 \nu \Sigma_{f_{j'+1}} \\ \bar{\Sigma}_\ell^j &= \sum_{i=1}^{ni} (\nabla_x H_i^j)^2 D_{j'} + \sum_{i=ni+1}^{Ni} (\nabla_x H_i^j)^2 D_{j'+1}\end{aligned}\quad (II.7)$$

sendo j' e $j'+1$ índices de região material tais que

$$j' = 1 \text{ para } j = 1,$$

$$j' = 3 \text{ para } j = 2 \text{ e}$$

$D_{j'}$, $D_{j'+1}$, $\Sigma_{a_{j'}}$, $\Sigma_{a_{j'+1}}$, $\nu \Sigma_{f_{j'}}$ e $\nu \Sigma_{f_{j'+1}}$ parâmetros materiais pertencentes às diferentes regiões materiais.

Discretizando-se a (Eq. II.5) por diferenças finitas como exposto no Apêndice A, obtemos a equação:

$$\begin{aligned}-\ell_k Z_{k-1} + \left[\ell_k + \ell_{k+1} + (\bar{\Sigma}_{a_k} + \bar{\Sigma}_{\ell_k}) \Delta z_k \right] Z_k - \ell_{k+1} Z_{k+1} &= \\ &= \frac{1}{k} (\nu \bar{\Sigma}_{f_k} \Delta z_k) Z_k\end{aligned}\quad (II.8)$$

na qual os índices j que designavam a região axial foram abandonados em função do uso do índice de malha axial k , Δz_k é comprimento da malha axial k e os coeficientes ℓ_k e ℓ_{k+1} são da forma dada no Apêndice A.

Reescrevendo (II.8) em forma matricial temos:

$$\sum_{k=1}^{Nk} A_{nk} Z_k = \frac{1}{k} \sum_{k=1}^{Nk} C_{nk} Z_k, \quad n = 1, \dots, Nk \quad (II.9)$$

onde

$$A_{k,k-1} = -\ell_k$$

$$A_{k,k} = \ell_k + \ell_{k+1} + (\bar{\Sigma}_{\ell_k} + \bar{\Sigma}_{a_k}) \Delta z_k$$

$$A_{k,k+1} = -\ell_{k+1}$$

$$A_{nk} = 0 \quad \text{para } n \neq \begin{cases} k-1 \\ k \\ k+1 \end{cases}$$

$$C_{kk} = \bar{\nabla \Sigma}_{f_k} \cdot \Delta z_k$$

$$C_{nk} = 0 \quad \text{para } n \neq k \quad (II.10)$$

As condições de contorno e interface para as funções $Z(z)$ estão implícitas na discretização por diferenças finitas, restando portanto aplicar as condições para as funções $H^j(x)$, o que é feito do seguinte modo:

i) sendo $x = 0$ eixo de simetria, devemos ter

$$\nabla_x H^j \Big|_{x=0} = 0 \quad (II.11)$$

Aproximando-se a derivada de $H^j(x)$ na malha i por

$$(\nabla_x H^j)_i = \frac{1}{2} \left| \frac{H_{i+1}^j - H_i^j}{\Delta x_i} + \frac{H_i^j - H_{i-1}^j}{\Delta x_{i-1}} \right| \quad (II.12)$$

e considerando-se que, por simetria,

$$H_i^j = H_{i-1}^j \quad \text{para } i = 1$$

temos

$$(\nabla_x H^j)_{i=1} = \frac{1}{2\Delta x_1} (H_2^j - H_1^j) \quad (II.13)$$

ii) A outra condição a ser aplicada é a de fluxo nulo em $x=b$.

Para isto devemos fazer

$$H_{i+1}^j = -H_i^j \quad \text{para } i = N_i, \text{ o que leva a}$$

$$(\nabla_x H^j)_{i=N_i} = -\frac{1}{2\Delta x_{N_i}} (H_{N_i}^j + H_{N_i-1}^j) \quad (II.14)$$

O problema fica então descrito de modo apropriado à solução numérica, cujo método será exposto adiante.

b) Formulação Matricial

Esta formulação difere da anterior pelo fato de que em primeiro lugar é feita a discretização da equação de difusão a duas dimensões, e só então são calculados parâmetros ponderados de modo a reduzir o problema a uma dimensão.

A partir da Eq. (II.1), sujeita às condições de contorno e continuidade descritas anteriormente, obtemos a equação bidimensional discretizada por diferenças finitas:

$$\begin{aligned} & \ell_{|i-1,i|k} (\phi_{ik} - \phi_{i-1,k}) + \ell_{|i,i+1|k} (\phi_{ik} - \phi_{i+1,k}) + \\ & + \ell_{|i|k-1,k|} (\phi_{ik} - \phi_{i,k-1}) + \ell_{|i|k,k+1|} (\phi_{ik} - \phi_{i,k+1}) + \\ & + \Sigma_a \phi_{ik} = \frac{1}{k} v \Sigma_f \phi_{ik} \end{aligned} \quad (II.15)$$

na qual

$$\begin{aligned} \phi_{ik} &= H_i^j Z_k^j \\ \phi_{i-1,k} &= H_{i-1}^j Z_k^j \\ \phi_{i+1,k} &= H_{i+1}^j Z_k^j \\ \phi_{i,k-1} &= H_i^j Z_{k-1}^j \\ \phi_{i,k+1} &= H_i^j Z_{k+1}^j, \quad j = \begin{cases} 1 & \text{para } k = 1, \dots, nk \\ 2 & \text{para } k = nk+1, \dots, Nk \end{cases} \end{aligned}$$

Multiplicando os termos da Eq. (II.15) por H_i^j , com $j=1$ para $k = 1, \dots, nk$ e $j=2$ para $k = nk+1, \dots, Nk$ e somando em i , chegamos à equação discretizada para a função axial

$$\bar{L}_{k-1} Z_{k-1} + \bar{L}_k Z_k + \bar{L}_{k+1} Z_{k+1} = \frac{1}{k} \bar{C}_k Z_k \quad (II.16)$$

onde os coeficientes são

$$\bar{L}_{k-1} = - \sum_{i=1}^{Ni} (H_i^j)^2 \ell_{i|k-1,k|}$$

$$\begin{aligned} \bar{L}_k = & \sum_{i=1}^{Ni} H_i^j \left\{ \ell_{i-1,i|k} (H_i^j - H_{i-1}^j) + \ell_{i,i+1|k} (H_i^j - H_{i+1}^j) + \right. \\ & \left. + \ell_{i|k-1,k} H_i^j + \ell_{i|k,k+1} H_i^j + \Sigma_{aj, \Delta x_i \Delta z_k} H_i^j \right\} \end{aligned}$$

$$\bar{L}_{k+1} = - \sum_{i=1}^{Ni} (H_i^j)^2 \ell_{i|k,k+1|}$$

$$\bar{C}_k = \sum_{i=1}^{Ni} (H_i^j)^2 \Sigma_{f_j, \Delta x_i \Delta z_k} \quad (11.17)$$

sendo j' índice de região material tal que

$$j' = 1 \quad \text{para} \quad i = 1, \dots, ni \quad \text{e} \quad j = 1$$

$$j' = 2 \quad \text{para} \quad i = ni+1, \dots, Ni \quad \text{e} \quad j = 1$$

$$j' = 3 \quad \text{para} \quad i = 1, \dots, ni \quad \text{e} \quad j = 2$$

$$j' = 4 \quad \text{para} \quad i = ni+1, \dots, Ni \quad \text{e} \quad j = 2$$

Δx_j - comprimento de malha na direção x

Δz_k - comprimento de malha na direção z,

e

$\ell_{i-1,i|k}, \ell_{i,i+1|k}, \ell_{i|k-1,k|}, \ell_{i|k,k+1|}$ os coeficientes obtidos através da discretização por diferenças finitas a duas dimensões na forma dada no Apêndice A.

Podemos então reescrever (II.16) como

$$\sum_{k=1}^{Nk} A_{nk} Z_k = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{Nk} C_{nk} Z_k, \quad n=1, \dots, Nk \quad (II.18)$$

onde

$$A_{k,k-1} = \bar{L}_{k-1}$$

$$A_{kk} = \bar{L}_k$$

$$A_{k,k+1} = \bar{L}_{k+1}$$

$$A_{nk} = 0 \quad \text{para} \quad n \neq \begin{cases} k-1 \\ k \\ k+1 \end{cases}$$

$$C_{kk} = \bar{C}_k \quad e$$

$$C_{nk} = 0 \quad \text{para} \quad n \neq k$$

Nesta formulação tanto as condições de contorno quanto as de continuidade estão implícitas na discretização por diferenças finitas.

II.2 - Síntese Contínua

A aproximação para o fluxo de nêutrons em todo o reator (de acordo com o modelo representado na Fig. II.1) para este tipo de síntese é

$$\phi(x,z) = H^1(x) Z^1(z) + H^2(x) Z^2(z) \quad (II.19)$$

onde

$H^1(x)$ e $H^2(x)$ são as funções-teste características das regiões axiais 1 e 2 respectivamente (válidas em todo o reator) e $Z^1(z)$ e $Z^2(z)$ são funções axiais a serem calculadas.

O procedimento adotado na dedução das equações das formulações diferencial e matricial segue o padrão estabelecido para a síntese descontínua no que diz respeito à ordem em que são feitos o cálculo dos parâmetros médios e a discretização por diferenças finitas.

As condições de interface para este tipo de síntese são obtidas a partir de um método variacional (descrito no Apêndice B), enquanto que para síntese descontínua estas condições foram impostas arbitrariamente, sendo devidas ao problema de difusão e não à aproximação de síntese propriamente dita.

a) Formulação Diferencial

Substituindo-se o fluxo dado pela Eq. (II.19) na equação de difusão (II.1), e calculando-se parâmetros materiais ponderados em x com o auxílio das funções-teste $H^1(x)$ e $H^2(x)$, usadas como funções-peso, chegamos à equação para as funções axiais:

$$- \nabla_z \cdot \bar{D} \nabla_z Z(z) + (\bar{\Sigma}_a + \bar{\Sigma}_l) Z(z) = \frac{1}{k} \bar{\nabla} \bar{\Sigma}_f Z(z) \quad (II.20)$$

onde $Z(z)$ é um vetor composto pelas funções axiais Z^1 e Z^2 :

$$Z(z) = \begin{bmatrix} Z^1(z) \\ Z^2(z) \end{bmatrix} \quad (11.21)$$

e onde os parâmetros materiais médios são agora matrizes quadradas (cuja ordem é dada pelo número de funções-teste utilizadas), tais que

$$\bar{D} = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} \\ D_{21} & D_{22} \end{bmatrix} \quad \bar{\Sigma}_a = \begin{bmatrix} \Sigma_{a11} & \Sigma_{a12} \\ \Sigma_{a21} & \Sigma_{a22} \end{bmatrix}$$

$$\bar{\nu\Sigma}_f = \begin{bmatrix} \nu\Sigma_{f11} & \nu\Sigma_{f12} \\ \nu\Sigma_{f21} & \nu\Sigma_{f22} \end{bmatrix} \quad \Sigma_\ell = \begin{bmatrix} \Sigma_{\ell11} & \Sigma_{\ell12} \\ \Sigma_{\ell21} & \Sigma_{\ell22} \end{bmatrix}$$

sendo cada elemento α, β das matrizes acima dispostas calculado do seguinte modo:

$$D_{\alpha\beta} = (H^\alpha(x), DH^\beta(x))$$

$$\Sigma_{a\alpha\beta} = (H^\alpha(x), \Sigma_a H^\beta(x))$$

$$\nu\Sigma_{f\alpha\beta} = (H^\alpha(x), \nu\Sigma_f H^\beta(x))$$

$$\Sigma_{\ell_{\alpha\beta}} = (\nabla_x H^\alpha(x), D\nabla_x H^\beta(x)) \quad (II.22)$$

As condições de contorno a serem aplicadas à Eq. (II.20) são

i) em x:

$$\nabla_x \phi(x, z) \Big|_{x=0} = 0; \quad \phi(b, z) = 0 \quad (II.23)$$

ii) em z:

$$\phi(x, 0) = 0; \quad \phi(x, h) = 0 \quad (II.24)$$

e as condições de interface (obtidas através de método variacional) são

$$\left\{ H^1, D \left[H^1 \nabla_z Z^1 + H^2 \nabla_z Z^2 \right]_- - D \left[H^1 \nabla_z Z^1 + H^2 \nabla_z Z^2 \right]_+ \right\}_{x, z = \frac{h}{2}} = 0 \quad (II.25)$$

e

$$\left\{ H^2, D \left[H^1 \nabla_z Z^1 + H^2 \nabla_z Z^2 \right]_- - D \left[H^1 \nabla_z Z^1 + H^2 \nabla_z Z^2 \right]_+ \right\}_{x, z = \frac{h}{2}} = 0 \quad (II.26)$$

Podemos reescrever as Eq. (II.25) e (II.26) em forma matricial, tendo então como condição de interface

$$\begin{vmatrix} D_{11} & D_{12} \\ D_{21} & D_{22} \end{vmatrix} \nabla_z \begin{vmatrix} Z^1 \\ Z^2 \end{vmatrix} \Big|_{z = \frac{h^-}{2}} = \begin{vmatrix} D_{11} & D_{12} \\ D_{21} & D_{22} \end{vmatrix} \nabla_z \begin{vmatrix} Z^1 \\ Z^2 \end{vmatrix} \Big|_{z = \frac{h^+}{2}} \quad (II.27)$$

Discretizando-se a Eq. (II.20) por diferenças finitas (ver Apêndice A) obtemos a equação

$$\begin{aligned} - \bar{\ell}_k Z_{k-1} + \left[\bar{\ell}_k + \bar{\ell}_{k+1} + (\bar{\Sigma}_{a_k} + \bar{\Sigma}_{\ell_k}) \Delta z_k \right] Z_k - \\ - \bar{\ell}_{k+1} Z_{k+1} = \frac{1}{k} \overline{\Sigma}_f \Delta z_k Z_k \end{aligned} \quad (II.28)$$

na qual a forma discretizada de Z é

$$Z_{k+S} = \begin{vmatrix} Z^1_{k+S} \\ Z^2_{k+S} \end{vmatrix} \quad S = -1, 0, 1$$

os termos de fuga calculados por diferenças finitas são

$$\begin{aligned} \bar{\ell}_k &= 2\bar{D}_k (\Delta z_{k-1} \bar{D}_k + \Delta z_k \bar{D}_{k-1})^{-1} \bar{D}_{k-1} \\ \bar{\ell}_{k+1} &= 2\bar{D}_{k+1} (\Delta z_k \bar{D}_{k+1} + \Delta z_{k+1} \bar{D}_k)^{-1} \bar{D}_k \end{aligned} \quad (II.29)$$

e os parâmetros ponderados por malha axial k são

$$D_k^{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^{ni} H_i^\alpha D_{j,i} H_i^\beta + \sum_{i=ni+1}^{Ni} H_i^\alpha D_{j'+1,i} H_i^\beta$$

$$\Sigma_{a_k}^{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^{ni} H_i^\alpha \Sigma_{a,j,i} H_i^\beta + \sum_{i=ni+1}^{Ni} H_i^\alpha \Sigma_{a,j'+1,i} H_i^\beta$$

$$v\Sigma_{f_k}^{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^{ni} H_i^\alpha v\Sigma_{f,j,i} H_i^\beta + \sum_{i=ni+1}^{Ni} H_i^\alpha v\Sigma_{f,j'+1,i} H_i^\beta$$

$$\Sigma_{\ell_k}^{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^{ni} (\nabla_x H_i^\alpha) D_{j,i} (\nabla_x H_i^\beta) + \sum_{i=ni+1}^{Ni} (\nabla_x H_i^\alpha) D_{j'+1,i} (\nabla_x H_i^\beta)$$

(11.30)

para $\alpha, \beta = 1, 2$

de modo que

$$\bar{D}_k = \begin{vmatrix} D_{k11} & D_{k12} \\ D_{k21} & D_{k22} \end{vmatrix} \quad \bar{\Sigma}_{a_k} = \begin{vmatrix} \Sigma_{a_{k11}} & \Sigma_{a_{k12}} \\ \Sigma_{a_{k21}} & \Sigma_{a_{k22}} \end{vmatrix}$$

$$\overline{v\Sigma}_{f_k} = \begin{vmatrix} v\Sigma_{f_{k11}} & v\Sigma_{f_{k12}} \\ v\Sigma_{f_{k21}} & v\Sigma_{f_{k22}} \end{vmatrix} \quad \bar{\Sigma}_{\ell_k} = \begin{vmatrix} \Sigma_{\ell_{k11}} & \Sigma_{\ell_{k12}} \\ \Sigma_{\ell_{k21}} & \Sigma_{\ell_{k22}} \end{vmatrix}$$

sendo

$j' = 1$ para $k = 1, \dots, nk$

$j' = 3$ para $k = nk+1, \dots, Nk$

As equações (II.29) para os termos de fuga podem ser simplificadas se notarmos que, para k e $k-1$ pertencentes à mesma região axial, temos $\bar{D}_k = \bar{D}_{k-1}$, e que, para k e $k+1$ também pertencentes à mesma região axial, temos $\bar{D}_k = \bar{D}_{k+1}$. A forma simplificada dos termos de fuga que não envolvem malhas contíguas à interface \bar{e} , portanto,

$$\bar{L}_k = \frac{2}{(\Delta z_{k-1} + \Delta z_k)} \bar{D}_k$$

e

$$(II.31)$$

$$\bar{L}_{k+1} = \frac{2}{(\Delta z_{k+1} + \Delta z_k)} \bar{D}_{k+1}$$

As condições de interface (II.25) e (II.26), bem como as condições de contorno em z dadas por (II.24) estão implícitas na discretização por diferenças finitas, restando apenas reformular as condições (II.23) de modo apropriado à resolução numérica.

Procedendo de maneira análoga à adotada para a formulação diferencial, obtemos as seguintes expressões para o gradiente em x das funções $H^1(x)$ e $H^2(x)$:

i) $x = 0$ (ou $i=1$):

$$\left. \nabla_x H^j(x) \right|_{i=1} = \frac{1}{2\Delta x_1} (H_2^j - H_1^j), \quad j = 1, 2 \quad (II.32)$$

ii) $x = b$ (ou $i = Ni$):

$$\left. \nabla_x H_i^j(x) \right|_{i=Ni} = - \frac{1}{2\Delta x_{Ni}} (H_{Ni}^j + H_{Ni-1}^j), \quad j = 1, 2 \quad (II.33)$$

iii) $x \neq \begin{cases} 0 \\ b \end{cases}$ (ou $i \neq \begin{cases} 1 \\ Ni \end{cases}$):

$$\left. \nabla_x H_i^j(x) \right|_{i \neq \begin{cases} 1 \\ Ni \end{cases}} = \frac{1}{2\Delta x_i} (H_{i+1}^j - H_{i-1}^j), \quad j = 1, 2 \quad (II.34)$$

onde as equações (II.32) e (II.33) são equivalentes às equações (II.23).

A forma matricial da equação (II.28) é então

$$\sum_{k=1}^{Nk} A_{nk} Z_k = \frac{1}{\bar{\ell}} \sum_{k=1}^{Nk} C_{nk} Z_k, \quad n = 1, \dots, Nk \quad (II.35)$$

onde

$$A_{k,k-1} = -\bar{\ell}_k = - \begin{vmatrix} \ell_{k11} & \ell_{k12} \\ \ell_{k21} & \ell_{k22} \end{vmatrix}$$

$$A_{k,k} = \bar{\ell}_k + \bar{\ell}_{k+1} + (\bar{\Sigma}_{a_k} + \bar{\Sigma}_{\ell_k}) \Delta z_k =$$

$$= \begin{vmatrix} \ell_{k11} & \ell_{k12} \\ \ell_{k21} & \ell_{k22} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \ell_{k+111} & \ell_{k+112} \\ \ell_{k+121} & \ell_{k+122} \end{vmatrix} +$$

$$+ \Delta z_k \begin{vmatrix} \Sigma a_{k11} & \Sigma a_{k12} \\ \Sigma a_{k21} & \Sigma a_{k22} \end{vmatrix} + \Delta z_k \begin{vmatrix} \Sigma \ell_{k11} & \Sigma \ell_{k12} \\ \Sigma \ell_{k21} & \Sigma \ell_{k22} \end{vmatrix}$$

$$A_{k,k+1} = \bar{\ell}_{k+1} = - \begin{vmatrix} \ell_{k+111} & \ell_{k+112} \\ \ell_{k+121} & \ell_{k+122} \end{vmatrix}$$

$$A_{nk} = 0 \text{ para } n \neq \begin{cases} k-1 \\ k \\ k+1 \end{cases}$$

$$C_{kk} = \overline{\nu \Sigma f_k} \Delta z_k = \Delta z_k \begin{vmatrix} \nu \Sigma f_{k11} & \nu \Sigma f_{k12} \\ \nu \Sigma f_{k21} & \nu \Sigma f_{k22} \end{vmatrix}$$

$$\text{e } C_{nk} = 0 \text{ para } n \neq k.$$

(II.36)

b) Formulação Matricial

A partir da equação de difusão a duas dimensões discretizada por diferenças finitas

$$\begin{aligned} & \ell_{|i-1,i|k}(\phi_{ik} - \phi_{i-1,k}) + \ell_{|i,i+1|k}(\phi_{ik} - \phi_{i+1,k}) + \\ & + \ell_{|i,k-1|k}(\phi_{ik} - \phi_{i,k-1}) + \ell_{|i,k,k+1|}(\phi_{ik} - \phi_{i,k+1}) + \\ & + \Sigma_{a_{ik}} \Delta x_i \Delta z_k \phi_{ik} = \frac{1}{k} v \Sigma_{f_{ik}} \Delta x_i \Delta z_k \phi_{ik} \end{aligned} \quad (II.37)$$

onde

$$\phi_{ik} = H_i^1 Z_k^1 + H_i^2 Z_k^2$$

$$\phi_{i-1,k} = H_{i-1}^1 Z_k^1 + H_{i-1}^2 Z_k^2$$

$$\phi_{i+1,k} = H_{i+1}^1 Z_k^1 + H_{i+1}^2 Z_k^2$$

$$\phi_{i,k-1} = H_i^1 Z_{k-1}^1 + H_i^2 Z_{k-1}^2$$

$$\phi_{i,k+1} = H_i^1 Z_{k+1}^1 + H_i^2 Z_{k+1}^2$$

$$\Sigma_{a_{ik}} = \begin{cases} \Sigma_{a_1} & \text{para } i = 1, \dots, n_i \\ \Sigma_{a_2} & \text{para } i = n_i+1, \dots, N_i \end{cases} \quad k = 1, \dots, n_k$$

$$\Sigma_{a_{ik}} = \begin{cases} \Sigma_{a_3} & \text{para } i = 1, \dots, n_i \\ \Sigma_{a_4} & \text{para } i = n_i+1, \dots, N_i \end{cases} \quad k = n_k+1, \dots, N_k$$

$$v_{\Sigma f_{ik}} = \begin{cases} v_{\Sigma f_1} & \text{para } i = 1, \dots, n_i \\ v_{\Sigma f_2} & \text{para } i = n_i + 1, \dots, N_i \end{cases} \quad k = 1, \dots, n_k$$

$$v_{\Sigma f_{ik}} = \begin{cases} v_{\Sigma f_3} & \text{para } i = 1, \dots, n_i \\ v_{\Sigma f_4} & \text{para } i = n_i + 1, \dots, N_i \end{cases} \quad k = n_k + 1, \dots, N_k$$

$$D_{ik} = \begin{cases} D_1 & \text{para } i = 1, \dots, n_i \\ D_2 & \text{para } i = n_i + 1, \dots, N_i \end{cases} \quad k = 1, \dots, n_k$$

$$D_{ik} = \begin{cases} D_3 & \text{para } i = 1, \dots, n_i \\ D_4 & \text{para } i = n_i + 1, \dots, N_i \end{cases} \quad k = n_k + 1, \dots, N_k$$

$$\ell_{|i-1, i|k} = \frac{2\Delta z_k}{\frac{\Delta x_i}{D_{ik}} + \frac{\Delta x_{i-1}}{D_{i-1, k}}} ; \ell_{|i, i+1, k|} = \frac{2\Delta z_k}{\frac{\Delta x_i}{D_{ik}} + \frac{\Delta x_{i+1}}{D_{i+1, k}}}$$

$$\ell_{i|k-1, k|} = \frac{2\Delta x_i}{\frac{\Delta z_k}{D_{ik}} + \frac{\Delta z_{k-1}}{D_{i, k-1}}} ; \ell_{i|k, k+1|} = \frac{2\Delta x_i}{\frac{\Delta z_k}{D_{ik}} + \frac{\Delta z_{k+1}}{D_{i, k+1}}}$$

chegamos, através do uso de H^1 e H^2 como funções-peso, à equação para as funções axiais.

$$\sum_{\beta=1}^2 \left\{ -\ell_{k-1, k}^{\alpha\beta} z_{k-1}^{\beta} + \ell_k^{\alpha\beta} z_k^{\beta} - \ell_{k, k+1}^{\alpha\beta} z_{k+1}^{\beta} \right\} =$$

$$= \frac{1}{k} \sum_{\beta=1}^2 c_k^{\alpha\beta} z_k^{\beta}, \quad \alpha = 1, 2 \quad (II.38)$$

na qual os coeficientes são dados por

$$\ell_{k-1,k}^{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^{Ni} H_i^{\alpha} \ell_i |k-1,k| H_i^{\beta}$$

$$\begin{aligned} L_k^{\alpha\beta} = & \sum_{i=1}^{Ni} \left\{ H_i^{\alpha} \left[\ell_{i-1,i} |k| + \ell_{i,i+1} |k| + \ell_i |k-1,k| + \right. \right. \\ & + \left. \ell_i |k,k+1| + \sum_{ik} \Delta x_i \Delta z_k \right] H_i^{\beta} + H_i^{\alpha} \ell_{i-1,i} |k| H_{i-1}^{\beta} + \\ & + H_i^{\alpha} \ell_{i,i+1} |k| H_{i+1}^{\beta} \end{aligned}$$

$$\ell_{k,k+1}^{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^{Ni} H_i^{\alpha} \ell_i |k,k+1| H_i^{\beta}$$

$$C_k^{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^{Ni} H_i^{\alpha} \nu_{f_{ik}} \Delta x_i \Delta z_k H_i^{\beta}, \quad \alpha, \beta = 1, 2 \quad (II.39)$$

Na Eq. (II.38) tanto as condições de contor no quanto as de interface estão contidas nos termos de fuga calculados por diferenças finitas, não sendo necessária nenhu ma imposição adicional.

Podemos então reescrever (II.38) como

$$\sum_{k=1}^{Nk} A_{nk} Z_k = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{Nk} C_{nk} Z_k \quad n = 1, \dots, Nk \quad (II.40)$$

onde

$$Z_k = \begin{vmatrix} Z_k^1 \\ Z_k^2 \end{vmatrix}$$

$$A_{k,k-1} = -\bar{\ell}_{k-1,k} = - \begin{vmatrix} \ell_{k-1,k11} & \ell_{k-1,k12} \\ \ell_{k-1,k21} & \ell_{k-1,k22} \end{vmatrix}$$

$$A_{k,k} = \bar{L}_k = \begin{vmatrix} L_{k11} & L_{k12} \\ L_{k21} & L_{k22} \end{vmatrix}$$

$$A_{k,k+1} = -\bar{\ell}_{k,k+1} = - \begin{vmatrix} \ell_{k,k+111} & \ell_{k,k+112} \\ \ell_{k,k+121} & \ell_{k,k+122} \end{vmatrix}$$

$$A_{nk} = 0 \quad \text{para } n \neq \begin{cases} k-1 \\ k \\ k+1 \end{cases}$$

$$C_{kk} = \bar{C}_k = \begin{vmatrix} C_{k11} & C_{k12} \\ C_{k21} & C_{k22} \end{vmatrix}$$

e

$$C_{nk} = 0 \quad \text{para } n \neq k$$

(II.41)

Como a matriz A para este tipo de síntese é uma matriz "quase-tridiagonal" (ou tridiagonal por blocos), foi necessário um algoritmo para solução do sistema que levasse em conta esta característica. Este algoritmo, que utiliza o método de eliminação de Gauss⁽¹²⁾, foi acoplado a outro algoritmo que, pelo método de potência^(13,14), calcula as funções axiais.

Uma descrição resumida dos algoritmos utilizados na resolução das equações na variável axial para os diversos tipos de síntese estudados está contida no Capítulo III.

11.3 - Síntese Pseudo-Contínua

Para a aplicação desta aproximação de síntese, fez-se uma divisão do modelo de reator representado na Fig. (II.1) em três codomínios axiais (ver Fig. II.3), sendo o primeiro codomínio constituído por uma parte das regiões materiais 1 e 2, o segundo codomínio por uma parte de cada uma das quatro regiões materiais, e o terceiro por parte das regiões materiais 3 e 4.

Em virtude desta divisão, torna-se óbvio que, para o primeiro codomínio, somente a função-teste $H^1(x)$ será necessária, o mesmo acontecendo para o terceiro codomínio em relação à função-teste $H^2(x)$. Para o segundo codomínio ambas as funções serão utilizadas.

A forma do fluxo para o segundo codomínio é

$$\phi^2(x,z) = \left[H^1(x)\alpha^1(z) + H^2(x)\alpha^2(z) \right] Z(z) \quad (II.42)$$

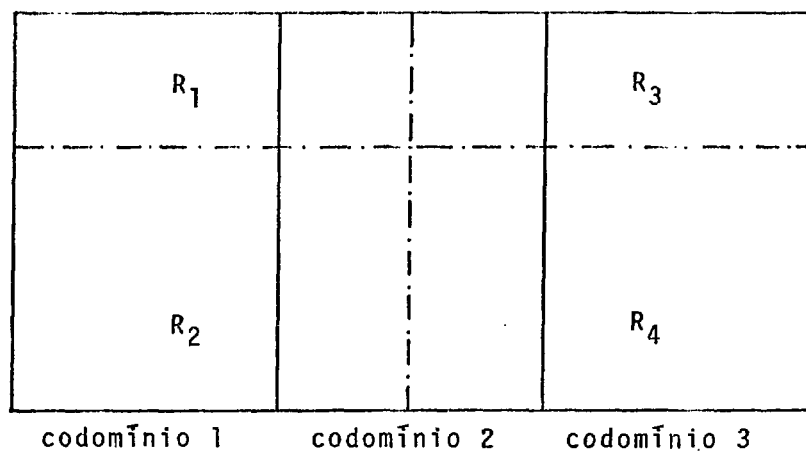
Para o primeiro codomínio teremos $\alpha^1(z) = 1$ e $\alpha^2(z) = 0$, ficando o fluxo para este codomínio na forma

$$\phi^1(x,z) = H^1(x)Z(z) \quad (II.43)$$

Para o terceiro codomínio $\alpha^1(z) = 0$ e $\alpha^2(z) = 1$, levando, portanto, a expressão para o fluxo

$$\phi^3(x,z) = H^2(x)Z(z) \quad (II.44)$$

Fig. II.3 - Divisão do Reator em Codomínios



Notamos, então, que a aproximação para o fluxo nos codomínios 1 e 3 é idêntica à de síntese descontínua, e que somente no codomínio 2 será necessário o cálculo das funções $\alpha^1(z)$ e $\alpha^2(z)$, que obedecerão às seguintes condições⁽¹⁰⁾.

$$\alpha^1(z) + \alpha^2(z) = 1 \quad (\text{II.45})$$

$$\alpha^1 \Big|_+ = \alpha^2 \Big|_- = 0$$

$$\alpha^1 \Big|_- = \alpha^2 \Big|_+ = 1 \quad (\text{II.46})$$

$$\nabla_z \alpha^1 \Big|_{\pm} = \nabla \alpha^2 \Big|_{\pm} = 0 \quad (\text{II.47})$$

onde $\Big|_-$ e $\Big|_+$ são os extremos inferior e superior do codomínio

A condição (II.45) preserva a ordem de grandeza dos parâmetros materiais utilizados, e, para o caso em que o codomínio é composto por somente uma região axial, leva à aproximação de síntese descontínua, como visto nas equações (II.43) e (II.44).

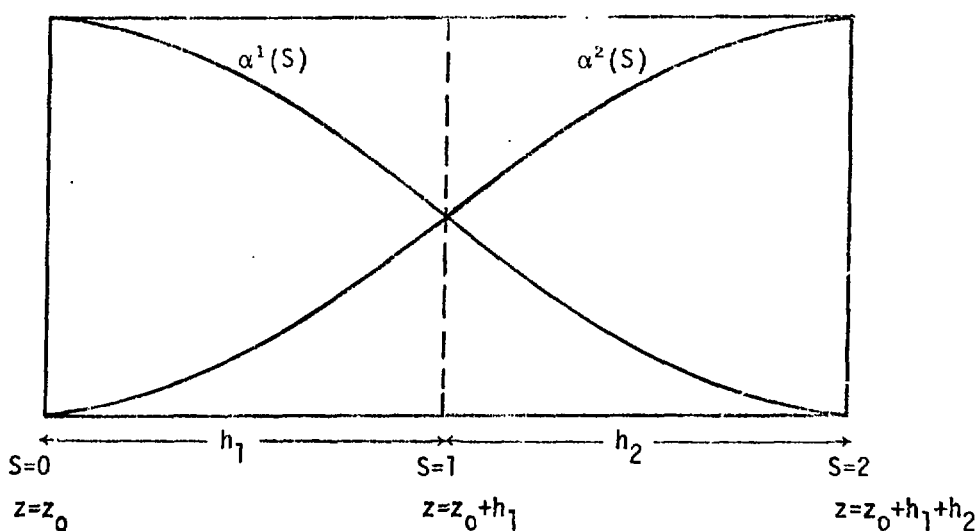
A condição dada pelas equações (II.46) faz com que o fluxo nos extremos do codomínio seja dado pelo produto da função-teste característica de cada extremo do codomínio pela função axial $Z(z)$. Como as funções-mistura α^1 e α^2 dão a influência de cada uma das regiões materiais componentes do co-

domínio no fluxo total para o codomínio, esta condição expressa o fato de que, para pontos afastados da interface de duas regiões axiais, predomina a função-teste característica da região em questão.

Finalmente, temos na equação (II.47) a condição necessária à conservação da corrente total nas interfaces dos codomínios.

Antes de discretizarmos a equação de difusão a duas dimensões (II.1), devemos calcular as funções α^1 e α^2 para o segundo codomínio.

Fig. II.4 - Funções-Mistura para o Codomínio 2



Por uma questão de conveniência, $\alpha^1(z)$ e $\alpha^2(z)$ serão avaliadas em função de uma variável S definida como (ver Fig. II.4):

i) $S = \frac{z-z_0}{h_1}$ para a primeira região axial do codomínio, ou seja, para

$z_0 \leq z \leq z_0 + h_1$, teremos $0 \leq S \leq 1$

ii) $S = \frac{h_2 - h_1}{h_2} + \frac{z - z_0}{h_2}$ para a segunda região axial do codomínio,
de modo que para

$z_0 + h_1 < z \leq z_0 + h_1 + h_2$, teremos $1 < S \leq 2$

Definimos, então, α^1 e α^2 por

$$\alpha^1(S) = \begin{cases} 1 - \frac{1}{2} S^n & \text{para } 0 \leq S \leq 1 \\ \frac{1}{2} (2-S)^n & \text{para } 1 < S \leq 2 \end{cases} \quad \begin{matrix} \text{(II.48a)} \\ \text{(II.48b)} \end{matrix}$$

$$\alpha^2(S) = 1 - \alpha^1(S) \quad \text{(II.49)}$$

sendo $n = 1, 2, 3, \dots$

As funções-mistura dadas por (II.48a), (II.48b) e (II.49) são contínuas, devendo-se, portanto, discretizá-las. Para facilitar os cálculos, consideraremos uma divisão do reator em malhas axiais de igual comprimento, ou seja:

$$\Delta z_k = \Delta z \quad \text{para } k = 1, \dots, Nk$$

Sejam

n_0 - última malha do codomínio 1

n_1 - última malha do codomínio 2

m_1 - número de malhas da primeira região do codomínio 2

m_2 - número de malhas da segunda região do codomínio 2,

logo,

$$n_1 = m_1 + m_2 + n_0$$

$$h_1 = m_1 \Delta z$$

$$h_2 = m_2 \Delta z$$

$$z_0 = n_0 \Delta z$$

$$z_k = k \Delta z$$

A discretização da variável S é então feita:

$$S_k = \frac{z - z_0}{h_1} = \frac{(k - n_0)}{m_1} \text{ para } n_0 + 1 \leq k \leq n_0 + m_1 \quad (\text{II.50a})$$

$$S_k = \frac{h_2 - h_1}{h_2} + \frac{z - z_0}{h_2} = \frac{k + m_2 - m_1 - n_0}{m_2}$$

$$\text{para } n_0 + m_1 + 1 \leq k \leq n_0 + m_1 + m_2 \quad (\text{II.50b})$$

O valor médio da função $\alpha^1(z)$ para uma malha da primeira região do codomínio é dado pela expressão

$$\bar{\alpha}_k^1 = \frac{\int_{S_i}^{S_f} (1 - \frac{1}{2} S^n) dS}{\int_{S_i}^{S_f} dS}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{II.51})$$

onde $S_f = \frac{k-n_0}{m_1}$ e $S_i = \frac{k-n_0-1}{m_1}$, $n_0+1 \leq k \leq n_0 + m_1$

Logo, temos

$$\int_{S_i}^{S_f} dS = \frac{1}{m_1}$$

$$\begin{aligned} \bar{\alpha}_k^1 &= m_1 \left\{ \frac{1}{m_1} - \frac{1}{2} \left[\frac{S_f^{n+1}}{n+1} - \frac{S_i^{n+1}}{n+1} \right] \right\} = 1 - \frac{1}{2(n+1)m_1^n} \left| (k-n_0)^{n+1} - \right. \\ &\quad \left. - (k-n_0-1)^{n+1} \right| \end{aligned} \quad (II.52)$$

O valor médio de $\alpha^2(z)$ para esta malha \bar{e} , então

$$\alpha_k^2 = \frac{1}{2(n+1)m_1^n} \left| (k-n_0)^{n+1} - (k-n_0-1)^{n+1} \right| \quad (II.53)$$

Do mesmo modo, calculamos o valor médio de $\alpha^1(z)$ para o segundo intervalo

$$n_0 + m_1 + 1 \leq k \leq n_0 + m_1 + m_2$$

como

$$\bar{\alpha}_k^1 = \frac{\int_{S_i}^{S_f} \frac{1}{2} (2-S)^n dS}{\int_{S_i}^{S_f} dS} \quad (II.54)$$

Logo,

$$\bar{\alpha}_k^1 = \frac{1}{2(n+1)m_2^n} \left\{ (n_1+1-k)^{n+1} - (n_1-k)^{n+1} \right\} \quad (II.55)$$

e

$$\bar{\alpha}_k^2 = 1 - \frac{1}{2(n+1)m_2^n} \left\{ (n_1+1-k)^{n+1} - (n_1-k)^{n+1} \right\} \quad (II.56)$$

Discretizando-se a equação (II.1) por diferenças finitas e usando-se

$$\psi(x, z) = H^1(x)\alpha^1(z) + H^2(x)\alpha^2(z)$$

como função-peso, chega-se à equação para a função axial $Z(z)$:

$$-\bar{\ell}_{|k-1,k|}Z_{k-1} + \bar{L}_k Z_k - \bar{\ell}_{|k,k+1|}Z_{k+1} = \frac{1}{\bar{k}} \overline{\nu \Sigma}_f Z_k \quad (II.57)$$

na qual os coeficientes médios são dados por

$$\bar{\ell}_{|k-1,k|} = \sum_{i=1}^{Ni} \psi_{ik} \ell_{i|k-1,k|} \psi_{i,k-1} \quad (II.58a)$$

$$\begin{aligned} \bar{L}_k = & \sum_{i=1}^{Ni} \left| \psi_{ik} \left\{ \ell_{i-1,i|k} (\psi_{ik} - \psi_{i-1,k}) + \right. \right. \\ & \left. \left. + \ell_{i,i+1|k} (\psi_{ik} - \psi_{i+1,k}) + (\ell_{i|k-1,k|} + \ell_{i|k,k+1|} + \right. \right. \end{aligned}$$

$$\left. \sum_{i,k} \Delta x_i \Delta z_k \right\} \psi_{ik} \quad (II.58b)$$

$$\bar{\ell}_{|k,k+1|} = \sum_{i=1}^{N_i} \psi_{ik} \ell_{i|k,k+1|} \psi_{i,k+1} \quad (II.58c)$$

$$\overline{v\Sigma}_{f_k} = \sum_{i=1}^{N_i} \psi_{ik}^2 v\Sigma_{f_{ik}} \Delta x_i \Delta z_k \quad (II.58d)$$

os coeficientes $\ell_{|i-1,i|k}$, $\ell_{|i,i+1|k}$, $\ell_{i|k-1,k|}$ e $\ell_{i|k,k+1|}$ são da forma dada no Apêndice A,

e

$$\psi_{i+m,k} = H_{i+m}^1 \alpha_k^1 + H_{i+m}^2 \alpha_k^2$$

$$\psi_{i,k+m} = H_i^1 \alpha_{k+m}^1 + H_i^2 \alpha_{k+m}^2$$

$$\text{para } m = \begin{cases} -1 \\ 0 \\ 1 \end{cases}$$

A Eq. (II.57) pode então ser reescrita como

$$\sum_{k=1}^{N_k} A_{nk} Z_k = \frac{1}{k} \sum_{k=1}^{N_k} C_{nk} Z_k, \quad n=1, \dots, N_k \quad (II.59)$$

onde

$$A_{k,k-1} = -\bar{\ell}_{|k-1,k|}$$

$$A_{k,k} = \bar{L}_k$$

$$A_{k,k+1} = -\bar{\ell}_{|k,k+1|}$$

$$A_{nk} = 0 \text{ para } n \neq k$$

$$C_{kk} = \overline{v \Sigma} f_k$$

$$C_{nk} = 0 \text{ para } n \neq k$$

As condições de contorno do problema já estão contidas nos termos de fuga calculados por diferenças finitas. A equação discretizada, à parte o cálculo dos coeficientes médios, é igual à obtida na formulação matricial da síntese descontínua, sendo utilizado na sua resolução o mesmo algoritmo.

CAPÍTULO III

RESOLUÇÃO NUMÉRICA DAS EQUAÇÕES OBTIDAS ATRAVÉS DO USO DO MÉTODO DE SÍNTESE E DESCRIÇÃO DOS PROGRAMAS ELABORADOS

Como visto no Capítulo II, a aplicação dos diferentes tipos de aproximação de síntese conduziu a sistemas de equações da forma

$$AZ = \frac{1}{k} CZ, \quad (\text{III.1})$$

cujas resoluções numéricas foram feitas utilizando-se um algoritmo que associou os métodos da potência e da eliminação de Gauss.

Uma descrição resumida destes métodos será dada a seguir.

III.1 - Método da Potência^(13,14)

Na resolução de (III.1) pelo método da potência, são feitas aproximações sucessivas para o autovetor Z e o autovalor k , de modo que ao fim de um certo número de iterações há convergência do fluxo calculado para o autovetor fundamental de (III.1), bem como do k para o maior autovalor, correspondente ao autovetor fundamental.

O processo é iniciado com a atribuição arbitrá

ria de um valor para o fluxo, $Z = Z^{(0)}$, o qual fornece o valor inicial para a fonte:

$$S^{(0)} = CZ^{(0)}. \quad (\text{III.2})$$

Fazendo-se também uma estimativa para o valor de k , $k = k^{(0)}$, ficamos com o sistema

$$AZ^{(1)} = \frac{1}{k^{(0)}} S^{(0)},$$

podendo-se então calcular o fluxo devido a estas estimativas iniciais:

$$Z^{(1)} = \frac{1}{k^{(0)}} A^{-1} S^{(0)}. \quad (\text{III.3})$$

O fluxo obtido deste modo servirá ao cálculo de uma nova fonte,

$$S^{(1)} = CZ^{(1)},$$

o que permitirá novo cálculo para k e Z , e assim por diante.

A repetição deste processo permite o cálculo do fluxo pela fórmula geral

$$Z^{(n+1)} = \frac{1}{k^{(n)}} A^{-1} S^{(n)}, \quad (\text{III.4})$$

onde n é o número de iterações já realizadas.

A maneira pela qual o valor de k a cada iteração é calculado baseia-se no fato de que, após um certo número de iterações, o valor do fluxo deverá convergir para o autovetor fundamental, ou seja: após um número suficientemente grande de iterações teremos

$$AZ^{(n+1)} \approx \frac{1}{k^{(n+1)}} CZ^{(n+1)}, \quad (\text{III.5})$$

o que tornará possível o cálculo de $k^{(n+1)}$ pela integração dos dois membros de (III.5) no volume total do reator:

$$k^{(n+1)} \approx \frac{\int CZ^{(n+1)} dV}{\int AZ^{(n+1)} dV}. \quad (\text{III.6})$$

Como, por (III.4) temos

$$\int AZ^{(n+1)} dV \approx \frac{1}{k^{(n)}} \int CZ^{(n)} dV = \frac{1}{k^{(n)}} \int S^{(n)} dV,$$

podemos reescrever (III.6) como

$$k^{(n+1)} = \frac{\int S^{(n+1)} dV}{\frac{1}{k^{(n)}} \int S^{(n)} dV}, \quad (\text{III.7})$$

relacionando portanto o valor atual de k ao seu valor anterior, bem como ao valor anteriormente obtido para a fonte. Isto nos dá para o primeiro valor calculado de k :

$$k^{(1)} = \frac{\int S^{(1)} dV}{\frac{1}{k^{(0)}} \int S^{(0)} dV}. \quad (\text{III.8})$$

Avaliando-se $k^{(0)}$ como

$$k^{(0)} = \int S^{(0)} dV, \quad (\text{III.9})$$

teremos

$$k^{(1)} = \int S^{(1)} dV \quad (\text{III.10})$$

e, de modo geral

$$k^{(n)} = \int S^{(n)} dV \quad (\text{III.11})$$

Podemos então estabelecer o seguinte esquema iterativo para o cálculo de Z e k :

- 1) Estimar valor inicial para Z : $Z^{(0)}$.
Fazer n (número de iterações) = 1.
- 2) Calcular a fonte: $S^{(n-1)} = CZ^{(n-1)}$.
- 3) Calcular k : $k^{(n-1)} = (1, S^{(n-1)})$.
- 4) Verificar a convergência de $k^{(n-1)}$ e de $Z^{(n-1)}$.
- 5) Dividir a fonte pelo k , ou seja, normalizar a fonte:
$$S^{(n-1)} = \frac{S^{(n-1)}}{k^{(n-1)}}.$$
- 6) Resolver o sistema $AZ^{(n)} = S^{(n-1)}$.
- 7) Atualizar o número da iteração: $n = n + 1$.
Retornar a (2).

A convergência de $Z^{(n)}$ e $k^{(n)}$ para o autovetor e o autovalor fundamentais pode ser provada matematicamente⁽¹²⁾.

7

Nas seções seguintes será mostrado o método utilizado para a re solução do sistema dado no item (6) do esquema acima, e sua adaptação ao caso em que a matriz A é composta por elementos que são, por sua vez, matrizes.

III.2.a - Método de Eliminação de Gauss⁽¹²⁾

Este método vale-se da forma tridiagonal da matriz A:

$$A = \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & 0 & 0 & . & . & . & . & 0 & 0 & 0 \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & 0 & . & . & . & . & . & . & . \\ 0 & A_{32} & A_{33} & A_{34} & 0 & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . & . & . & . & . \\ 0 & . & . & . & . & . & . & . & A_{N-1,N-2} & A_{N-1,N-1} & A_{N-1,N} \\ 0 & . & . & . & . & . & . & . & 0 & A_{N,N-1} & A_{N,N} \end{vmatrix}$$

para, através de sucessivas operações algébricas, transformar o sistema representado em (III.1) em um novo sistema,

$$\begin{vmatrix} 1 & -B_1 & 0 & . & . & . & . & 0 \\ 0 & 1 & -B_2 & 0 & . & . & . & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -B_3 & . & . & . & 0 \\ . & . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . & . \\ 0 & 0 & 0 & . & . & . & 1 & -B_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & . & . & . & 0 & 1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} Z_1 \\ Z_2 \\ . \\ . \\ . \\ Z_{N-1} \\ Z_N \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} SN_1 \\ SN_2 \\ . \\ . \\ . \\ SN_{N-1} \\ SN_N \end{vmatrix} \quad (III.12)$$

no qual os B_i e SN_i estão relacionados às componentes do siste

ma original pelas fórmulas:

$$B_i = \frac{A_{i,i+1}}{A_{i,i} - A_{i,i-1}B_{i-1}}, \quad (\text{III.13})$$

$$B_1 = \frac{A_{12}}{A_{11}}, \quad (\text{III.14})$$

$$SN_i = \frac{S_i - A_{i,i-1}SN_{i-1}}{A_{i,i} - A_{i,i-1}B_{i-1}}, \quad (\text{III.15})$$

$$SN_1 = \frac{S_1}{A_{11}}. \quad (\text{III.16})$$

Levando estas relações em (III.12) obtemos para a componente N do vetor Z:

$$Z_N = SN_N, \quad (\text{III.17})$$

e para a componente N-1:

$$Z_{N-1} = -B_{N-1}Z_N + SN_{N-1}. \quad (\text{III.18})$$

Logo, a componente i do vetor Z pode ser calculada por

$$Z_i = -B_iZ_{i+1} + SN_i, \quad i = N-1, N-2, \dots, 1. \quad (\text{III.19})$$

III.2.b - Extensão do Método de Eliminação de Gauss para Matrizes Quase-Tridiagonais:

O método esquematizado na seção anterior é ade

quando ao caso em que os componentes de A são escalares, como acontece nas sínteses descontínua e pseudo-contínua. Para a matriz A obtida usando-se síntese contínua, é necessária uma alteração deste método que permita a solução do sistema em questão para A quase-tridiagonal.

Tendo-se, portanto, o sistema

$$AZ = \frac{1}{K} S$$

onde cada elemento de matriz A é por sua vez uma matriz:

$$A_{ni} = \begin{bmatrix} A_{ni11} & A_{ni12} \\ A_{ni21} & A_{ni22} \end{bmatrix} \quad n, i = 1, \dots, NK, \quad (\text{III.20})$$

e onde cada componente i dos vetores Z e S é da forma

$$Z_i = \begin{bmatrix} z_i^1 \\ z_i^2 \end{bmatrix}; \quad S_i = \begin{bmatrix} s_i^1 \\ s_i^2 \end{bmatrix} \quad i = 1, \dots, NK, \quad (\text{III.21})$$

as fórmulas que permitem o cálculo de Z através do sistema transformado (III.12) tornam-se:

$$B_i = \left[A_{ii} - A_{i,i-1} B_{i-1} \right]^{-1} A_{i,i+1} \quad (\text{III.22})$$

$$B_1 = A_{11}^{-1} A_{12} \quad (\text{II.23})$$

$$SN_i = \left[A_{ii} - A_{i,i-1} B_{i-1} \right]^{-1} \left[S_i - A_{i,i-1} SN_{i-1} \right] \quad (\text{III.24})$$

$$SN_1 = A_{11}^{-1} S_1 \quad (\text{III.25})$$

$$Z_N = SN_N \quad (\text{III.26})$$

$$Z_i = SN_i - B_i Z_{i+1} \quad i = 1, \dots, N-1 \quad (\text{III.27})$$

III.3 - Descrição dos Programas Elaborados

Foram elaborados cinco programas, um para cada tipo de síntese e formulação utilizados, com base na formulação matemática desenvolvida no Capítulo II, e nos métodos descritos nas seções anteriores deste capítulo.

Os programas para a síntese descontínua são compostos por:

- i) Programa principal - lê as malhas limítrofes de cada região material, as funções-teste, os parâmetros materiais de cada região, o coeficiente de multiplicação efetivo de nêutrons fornecido pelo código de diferenças finitas utilizado como comparação, o comprimento das malhas nas direções x e z, um número que divide o comprimento das malhas nas duas direções (que permite variação nas dimensões do modelo de reator utilizado), e o número do problema em questão.

- calcula os parâmetros materiais ponderados, os termos de fuga, monta as matrizes A e C, calcula o erro (absoluto, relativo e percentual) do k obtido pela síntese em relação ao k dado pelo código de diferença finitas e os fluxos bidimensionais.

- imprime os parâmetros materiais de entrada, as malhas limítrofes de cada região, o número do problema, as dimensões das malhas, as funções-teste, o k fornecido pela síntese e pelo código de diferenças finitas, os erros calculados e o fluxo bidimensional composto pela função Z calculada pela subrotina UMD e pelas funções-teste.

ii) Subrotina UMD - calcula, a partir das matrizes A e C fornecidas pelo programa principal, a função Z e o autovalor k (utilizando o método da potência e o método de eliminação de Gauss).

- imprime o valor de k a cada iteração, bem como o número da iteração.

O programa de síntese pseudo-contínua é composto por:

1) Programa principal - lê todos os valores já especificados para os programas principais das sínteses descontínuas, além de ler as malhas limítrofes de cada codomínio e o expoente que aparece no cálculo das funções α^1 e α^2 .

- calcula os parâmetros materiais ponderados e os termos de fuga, com o auxílio das funções α^1 e α^2 fornecidas pela subrotina MIST, monta as matrizes A e C , calcula o erro (absoluto, relativo e percentual) do k fornecido pela síntese em relação ao k de diferenças finitas e calcula o fluxo bidimensional.

- imprime todos os valores já especificados pa-

ra o programa principal das sínteses descontínuas.

ii) Subrotina MIST - calcula as funções α^1 e α^2 para cada codomínio.

- imprime as funções α^1 e α^2 para cada codomínio.

iii) Subrotina UMD - calcula e imprime os mesmos valores já especificados para a subrotina UMD dos programas da síntese descontínua.

Os programas para a síntese contínua são compostos por:

i) Programa principal - lê todos os valores especificados para os programas principais das sínteses descontínuas.

ii) Subrotina UMD - calcula e imprime o autovalor e as duas funções axiais Z^1 e Z^2 da síntese contínua, através do método de eliminação de Gauss adaptado para matrizes quase tridiagonais.

iii) Subrotina MULTD - chamada pela subrotina UMD como auxiliar na inversão da matriz de destruição A. Multiplica uma matriz 2x2, especificada por 4 índices, por outra matriz 2x2, especificada por 3 índices.

iv) Subrotina MULTD2 - chamada pela subrotina UMD. Multiplica uma matriz 2x2, especificada por 3 índices, por outra matriz 2x2, especificada por 4 índices.

- v) Subrotina MULT3 - chamada pela subrotina UMD. Multiplica duas matrizes 2×2 , especificadas por 3 índices cada uma.
- vi) Subrotina MULT2 - chamada pela subrotina UMD. Multiplica uma matriz 2×2 , especificada por 3 índices, por um vetor de 2 componentes, especificado por 2 índices.
- vii) Subrotina INVD - chamada pelo programa principal e pela subrotina UMD. Inverte matrizes 2×2 , especificadas por 3 índices.

O uso de várias subrotinas pequenas como auxiliares da subrotina UMD, em vez de uma só subrotina que efetuasse todos os cálculos, é justificado pela economia em termos de memória e tempo de processador que estas subrotinas proporcionam, já que, por terem sido elaboradas para utilização em matrizes quadradas de ordem 2, calculam as multiplicações e inversões diretamente, a partir das expressões analíticas adequadas a cada caso.

CAPÍTULO IV

RESULTADOS E CONCLUSÕES

IV.1 - Resultados

IV.1.1 - Teste da Acurácia dos Programas de Síntese

Os cinco programas elaborados foram testados para cinco conjuntos de parâmetros materiais, dispostos na Tabela (C.1), correspondentes ao modelo esquematizado na Figura (II.1). Cada conjunto de parâmetros materiais foi utilizado duas vezes, uma com 15 malhas na direção x e 30 malhas na direção z (caso A), e outra com 30 malhas na direção x e 60 malhas na direção z (caso B), mantendo-se fixas as dimensões físicas de cada problema.

Os resultados obtidos para o autovalor estão contidos na Tabela (C.2), bem como o consumo de memória e de tempo de processador, além do erro percentual do autovalor fornecido por cada programa de síntese em relação ao obtido pelo código de diferenças finitas (CITATION⁽¹⁵⁾ ou TWODIM⁽¹⁶⁾) utilizado como solução de referência.

Os gráficos para os fluxos calculados pelos programas de síntese e pelo código de diferenças finitas para os casos 1A, 3A e 4A estão contidos nas Figuras (C.1), (C.2) e (C.3) respectivamente.

IV.1.2 - Teste da Influência da Constante de Normalização das Funções-Teste no Cálculo do Autovalor

Como a síntese descontínua utiliza somente uma função-teste para cada região axial, tornou-se necessário investigar a influência de diferentes normalizações para cada função-teste nos resultados obtidos com a aplicação deste tipo de síntese. Isto foi feito recalculando-se o caso 2A pelas duas formulações da síntese descontínua, para diferentes normalizações da função-teste correspondente à segunda região axial, assumindo a constante de normalização valores entre 0,1 e 1,9, com incrementos de 0,1. O problema foi, portanto, recalculado 19 vezes, e os resultados obtidos por estes cálculos estão dispostos na Tabela (C.3), correspondendo o valor 1,0 da constante de normalização ao caso em que ambas as funções-teste foram normalizadas do mesmo modo.

A Figura (C.4) mostra a variação nos valores calculados para o autovalor pela síntese descontínua diferencial, bem como, para efeito de comparação, o autovalor obtido no mesmo teste de normalização pela formulação matricial (o qual não apresentou nenhuma variação), e o autovalor fornecido pelo código de diferenças finitas.

IV.1.3 - Teste de Convergência para Síntese Contínua

Com o objetivo de investigar problemas causados pelo possível mau condicionamento da matriz A na solução fornecida pelos programas de síntese contínua, foram calculados os

casos 6A, 7A e 8A, os quais diferem apenas nas funções-teste utilizadas, como mostrado na Tabela (C. 4).

Os resultados obtidos para o caso 6A (para todos os programas de síntese) estão na Tabela (C. 5). Para os casos 7A e 8A somente os programas de síntese contínua (diferencial e matricial) foram testados, já que estes casos se destinam somente a evidenciar as falhas da síntese contínua devidas à dependência linear entre as funções-teste. No caso 7A a síntese contínua diferencial apresentou erro na execução do programa (divisão por zero na inversão da matriz A), e a síntese contínua matricial não apresentou convergência do autovalor (foi permitido um número máximo de 500 iterações, porém os valores calculados para o autovalor a cada iteração mostram que não haveria convergência com um número muito maior de iterações). Para o caso 8A deu-se o contrário: a síntese contínua diferencial não apresentou convergência do autovalor, enquanto a formulação matricial teve a sua execução suspensa devido à divisão por zero na inversão da matriz A. A Fig. (C. 5.) mostra os fluxos obtidos por todas as sínteses para o caso 6A.

Foi realizado também um teste no qual, a partir dos dados de entrada do caso 6A, a segunda função-teste foi substituída por uma combinação linear das duas funções-teste originais, calculada segundo a expressão abaixo:

$$H^3(x) = cH^1(x) + (1-c) H^2(x)$$

onde $H^1(x)$ e $H^2(x)$ são as funções-teste originais, previamente normalizadas, e c é constante que, em sucessivos cálculos, assu-

miu valores entre 0 e 1, com incrementos de 0,01.

Este teste teve o objetivo de evidenciar os problemas de convergência causados pela dependência linear das funções-teste empregadas. Os resultados mais significativos destes cálculos estão contidos na Tabela (C.6).

Tendo em vista os resultados obtidos com estes testes, foi feito um algoritmo para ortogonalização das funções-teste⁽¹⁷⁾, segundo o esquema a seguir, o qual foi acoplado aos programas de síntese contínua, para que fossem eliminados tais problemas de convergência.

Algoritmo de ortogonalização das funções-teste:

- 1) Calcular os produtos escalares (H^1, H^1) e (H^1, H^2)
- 2) Calcular a nova função-teste: $H_i^3 = H_i^2 - \frac{(H^1, H^2)}{(H^1, H^1)} H_i^1$, $i=1, \dots, N_i$

Os casos 7A e 8A foram recalculados através dos programas de síntese contínua acrescidos deste algoritmo de ortogonalização, estando os resultados dispostos na Tabela (C.7).

Para os casos em que normalmente não há problema de convergência (casos heterogêneos), o algoritmo de ortogonalização não alterou os resultados previamente obtidos.

IV.1.4 - Variação nas Dimensões dos Codomínios da Síntese Pseudo-Contínua

Como já mencionado no Capítulo II, as funções-mistura α^1 e α^2 da síntese pseudo-contínua modulam a influência das funções-teste características de cada região axial componente de um codomínio no fluxo total para este codomínio. Para pontos afastados da interface de duas regiões axiais temos predominância da função-teste característica da região axial em questão, mas para pontos próximos à interface não há esta predominância, sendo forte a influência de uma região axial sobre a outra.

É necessário, portanto, que as dimensões de um codomínio que contenha interface de duas regiões axiais diferentes sejam corretamente determinadas, estando a acurácia dos resultados obtidos com o uso deste tipo de síntese diretamente relacionada a uma estimativa adequada do intervalo no qual há forte influência de uma região axial sobre a outra.

Isto foi comprovado através da variação, em sucessivos cálculos, do número de malhas de cada codomínio, para os seguintes casos:

- 1) caso 2A
- 2) caso 4A
- 3) caso 4A com dimensões reduzidas a 1/4 das dimensões originais, ou seja, com $h = 15,00$ cm e $b = 7,50$ cm
- 4) casos 2A e 4A com dimensões reduzidas a 1/8 das dimensões originais, ou seja, com $h = 7,50$ e $b = 3,75$ cm.

A variação encontrada no autovalor para estes casos está na Tabela (C.8), na qual se encontram também os erros percentuais nos cálculos para o autovalor em relação aos valores fornecidos pelos códigos CITATION e TWODIM.

IV.2 - Conclusões

Consistindo este trabalho no estudo comparativo dos diferentes tipos de síntese e formulação já detalhados nos capítulos precedentes, com o objetivo de determinar qual dos diferentes algoritmos elaborados é o mais eficiente na resolução de problemas de difusão, os resultados expostos na seção anterior permitem chegar às seguintes conclusões:

- De modo geral a eficiência destes algoritmos (tanto no cálculo do autovalor quanto no do fluxo) na resolução dos diversos casos obedece à seguinte ordem:

- 1) síntese contínua matricial
- 2) síntese contínua diferencial
- 3) síntese pseudo-contínua
- 4) síntese descontínua matricial
- 5) síntese descontínua diferencial

- A investigação do efeito da variação da constante de normalização das funções-teste para a síntese descontínua evidencia que a formulação matricial é preferível à diferencial, pois elimina o problema de alteração nas condições de in-

terface de duas regiões axiais (a qual leva a avaliações errôneas do autovalor e consequentemente do fluxo de nêutrons) que a última apresenta quando a normalização das funções-teste é diferente.

- As duas formulações da síntese contínua apresentam problemas de mau condicionamento da matriz A quando funções-teste são linearmente dependentes (ou quase), problemas estes solucionados pelo acréscimo do algoritmo de ortogonalização das funções-teste, o qual proporciona, além da rápida convergência do autovalor, pequenos tempos de processador e consequente diminuição no consumo de memória.

- A estimativa correta das dimensões dos codomínios da síntese pseudo-contínua é fundamental ao bom desempenho deste tipo de síntese. Os testes efetuados não permitiram que se chegasse a um critério para a determinação a priori das dimensões ótimas dos codomínios para a resolução de qualquer tipo de problema, mas mostraram que, de modo geral, à medida que as dimensões do modelo são reduzidas (ou que o problema se torna mais acoplado), é necessário que se reduza significativamente o número de malhas (ou seja, que se reduza as dimensões) do codomínio que contenha interface de duas regiões axiais, a fim de minimizar-se o erro no cálculo do autovalor.

Um estudo mais completo deste item poderia levar a esta sistematização, mas, devido à extensão do presente trabalho, este estudo é deixado como sugestão para trabalhos posteriores.

Foi usado o valor $n=2$ para o expoente que aparece na definição das funções-mistura α^1 e α^2 , já que resultados obtidos anteriormente com o uso deste tipo de síntese⁽⁷⁾ não

mostraram significativa alteração com a variação deste parâmetro.

- O consumo evidentemente grande (em relação aos outros algoritmos) de memória e processador das duas formulações da síntese contínua é compensado pelos melhores resultados obtidos, exceto nos casos homogêneos ou quase homogêneos.

Nos casos homogêneos tanto a síntese descontínua quanto a pseudo-contínua apresentam ótimos resultados (sendo que a síntese contínua se transforma na descontínua, já que as funções-teste são iguais), tanto para o autovalor quanto para o fluxo. Para casos quase homogêneos o uso do algoritmo de ortogonalização tornou a síntese contínua competitiva em termos de computação e de resultados numéricos.

BIBLIOGRAFIA

1. ADAMS, C.H. - Current Trends in Methods for Neutron Diffusion Calculations, Nucl. Sci. Eng.: 64, 552-562 (1977).
2. OLIVEIRA, C.R.E. - Solução das Equações Multigrupo-Difusão pelo Método de Matrizes Resposta, Tese de Mestrado, COPPE-UFRJ (1980).
3. LARSEN, H. - Syntron, A Three-Dimensional Flux Synthesis Programme, Risø-M-1346 (1971)
4. BUCKEL, G. et al - Flux Synthesis Programme KASY for the Approximate Solution of the Three-Dimensional Multigroup-Neutron-Diffusion-Equation, Atomkernenergie: 30, 82-87 (1977).
5. WATSON, F.V. - SINT-I: A Two Group Spatial Synthesis Program, Relatório Técnico ET-465/74-2, COPPETEC, COPPE-UFRJ (1975).
6. FILL, H.D.O.A. - Síntese Pseudo-Contínua em Reatores PWR, Tese de Mestrado, COPPE-UFRJ (1976).
7. DA SILVA, C.F. - Aplicação do Método de Síntese Pseudo-Contínua no Código SINT-3D para Reatores PWR, Tese de Mestrado, COPPE-UFRJ (1979).
8. MEYER, J.E. Synthesis of Three Dimensional Power Shapes,

Proceedings of the Second United Nations International Conference on the Peaceful Uses of Atomic Energy: 11, 519 (1958).

9. KAPLAN, S. - Some New Methods of Flux Synthesis, Nucl. Sci. Eng.: 13, 22-31 (1962).
10. WATSON, F.V. e FILL, H.D.O.A. - Two-Group Diffusion Calculation Through Pseudo-Continuous Synthesis, Atomkernenergie: 30, 216-218 (1977).
11. POMRANING, G.C. - A Numerical Study of the Method of Weighted Residuals, Nucl. Sci. Eng.: 24, 291-301 (1966).
12. WACHSPRESS, E.L. - Iterative Solution of Elliptic Systems and Applications to the Neutron Diffusion Equations of Reactor Physics, Prentice-Hall Inc., N.J. (1966).
13. DUDERSTADT, J.J. e HAMILTON, L.J. - Nuclear Reactor Analysis, John Wiley & Sons, Inc., N.Y. (1976).
14. WATSON, F.V. - Notas não publicadas.
15. FOWLER, T.B. et al - Nuclear Reactor Core - Analysis Code: CITATION, ORNL-TM-2496. (1971)
16. KRISTIANSEN, G.K. - The Finite - Difference Neutron Diffusion Programme TWODIM, Risø-M-1891 (1976).
17. WATSON, F.V. - Comunicação pessoal.

18. WATSON, F.V. - Notas não publicadas.

19. WATSON, F.V. - Notas não publicadas.

APÊNDICE A

DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO POR DIFERENÇAS FINITAS - CENTRO DE MALHA⁽¹⁸⁾

A.1) - Um Grupo, Uma Dimensão

Como visto no Capítulo II, a equação de difusão a duas dimensões foi reduzida a uma equação na variável axial, com parâmetros médios calculados através do uso de funções-peso:

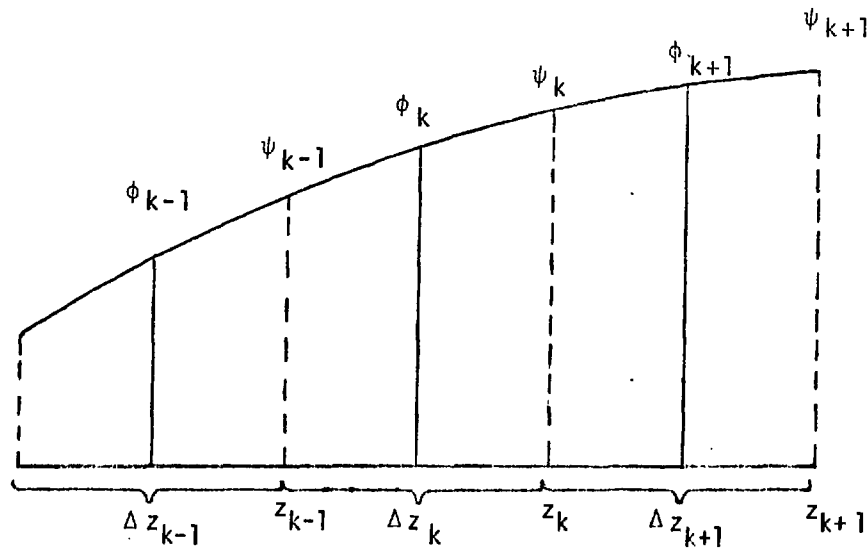
$$- \nabla_z \cdot \bar{D} \nabla_z Z(z) + (\bar{\Sigma}_a + \bar{\Sigma}_\ell) Z(z) = \frac{1}{k} \bar{\nu} \bar{\Sigma}_f Z(z) \quad (A.1)$$

a qual deve ser colocada em forma discreta.

Devemos, portanto, transformar a equação diferencial (A.1) em um conjunto de equações algébricas, levando em consideração a divisão do reator em malhas na direção axial (ver Fig. A.1).

Para isso é feita uma integração em z de cada termo de (A.1) no intervalo de uma malha axial k . Temos então

Fig. A.1 - Divisão em Malhas Axiais



$$- \int_{z_{k-1}}^{z_k} \nabla_z \cdot \bar{D} \nabla_z Z(z) dz + \int_{z_{k-1}}^{z_k} (\bar{\Sigma}_a + \bar{\Sigma}_\ell) Z(z) dz = \frac{1}{k} \int_{z_{k-1}}^{z_k} \bar{\nabla} \bar{\Sigma}_f Z(z) dz \quad (A.2)$$

onde o limite inferior de integração é z_{k-1} e o limite superior é z_k .

Os termos de (A.2) que não envolvem derivadas podem ser aproximados pelo valor do integrando no centro da malha k , multiplicado pelo intervalo de integração $\Delta z_k = z_k - z_{k-1}$

logo

$$\int_{z_{k-1}}^{z_k} (\bar{\Sigma}_a + \bar{\Sigma}_\ell) Z(z) dz \approx (\bar{\Sigma}_{a_k} + \bar{\Sigma}_{\ell_k}) \Delta z_k Z_k \quad (A.3)$$

$$\int \bar{v} \bar{\Sigma}_f Z(z) dz \approx \bar{v} \bar{\Sigma}_{f_k} \Delta z_k Z_k \quad (A.4)$$

onde $\bar{\Sigma}_{a_k}$, $\bar{\Sigma}_{\ell_k}$ e $\bar{v} \bar{\Sigma}_{f_k}$ são os valores dos parâmetros ponderados tomados no centro da malha k, e Z_k é o valor da função axial também no centro da malha k.

Para o primeiro termo de (A.2) temos

$$- \int \nabla_z \cdot \bar{D} \nabla_z Z(z) dz = \bar{D} \left. \frac{d}{dz} Z \right|_{z_{k-1}} - \bar{D} \left. \frac{d}{dz} Z \right|_{z_k} \quad (A.5)$$

sendo

$$\bar{D} \left. \frac{d}{dz} Z \right|_{z_k} = \bar{D}_k \frac{\psi_k - Z_k}{\frac{\Delta z_k}{2}} \equiv -L_k(z_k) \quad (A.6)$$

$$\bar{D} \left. \frac{d}{dz} Z \right|_{z_{k-1}} = \bar{D}_k \frac{Z_k - \psi_{k-1}}{\frac{\Delta z_k}{2}} \equiv L_k(z_{k-1}) \quad (A.7)$$

onde ψ_k e ψ_{k-1} são os valores da função axial nos extremos z_k e z_{k-1} da malha k.

Logo

$$- \int \nabla_z \cdot \bar{D} \nabla_z Z dz = L_k(z_{k-1}) + L_k(z_k) \quad (A.8)$$

nos dá a fuga total da malha k para as malhas adjacentes, sendo $L_k(z_{k-1})$ a fuga da malha k para a malha k-1 e $L_k(z_k)$ a fuga da malha k para a malha k+1.

Como desejamos expressões para a fuga da malha k que envolvam somente os valores da função axial no centro de cada malha, devemos relacionar a fuga em uma malha à fuga nas malhas adjacentes, o que é possível devido à condição de continuidade de corrente:

$$L_k(z_{k-1}) = - L_{k-1}(z_{k-1}) \quad (A.9)$$

$$L_k(z_k) = - L_{k+1}(z_{k+1}) \quad (A.10)$$

Substituindo em (A.9) a expressão para a fuga da malha $k-1$ calculada no ponto z_{k-1} , temos

$$L_k(z_{k-1}) = - \bar{D}_{k-1} \frac{z_{k-1} - \psi_{k-1}}{\frac{\Delta z_{k-1}}{2}}, \text{ e} \quad (A.11)$$

levando em (A.10) a expressão para a fuga da malha $k+1$ no ponto z_k temos

$$L_k(z_k) = - \bar{D}_{k+1} \frac{z_{k+1} - \psi_k}{\frac{\Delta z_{k+1}}{2}} \quad (A.12)$$

A confrontação de (A.7) e (A.11) nos dá o valor da função axial calculada no ponto z_{k-1} em termos dos valores da mesma função nos centros das malhas $k-1$ e k :

$$\psi_{k-1} = \frac{\frac{\bar{D}_k}{\Delta z_k} z_k + \frac{\bar{D}_{k-1}}{\Delta z_{k-1}} z_{k-1}}{\frac{\bar{D}_k}{\Delta z_k} + \frac{\bar{D}_{k-1}}{\Delta z_{k-1}}} \quad (A.13)$$

enquanto que (A.6) e (A.12) juntas fornecem o valor da função axial no ponto z_k :

$$\psi_k = \frac{\frac{\bar{D}_k}{\Delta z_k} z_k + \frac{\bar{D}_{k+1}}{\Delta z_{k+1}} z_{k+1}}{\frac{\bar{D}_k}{\Delta z_k} + \frac{\bar{D}_{k+1}}{\Delta z_{k+1}}} \quad (A.14)$$

Substituindo (A.13) em (A.7) e (A.14) em (A.6) temos

$$L_k(z_{k-1}) = \frac{2}{\frac{\Delta z_{k-1}}{\bar{D}_{k-1}} + \frac{\Delta z_k}{\bar{D}_k}} (z_k - z_{k-1}) \quad (A.15)$$

e

$$L_k(z_k) = \frac{2}{\frac{\Delta z_k}{\bar{D}_k} + \frac{\Delta z_{k+1}}{\bar{D}_{k+1}}} (z_k - z_{k+1}) \quad (A.16)$$

A forma final para a fuga da malha k é então

$$L_k = L_k(z_{k-1}) + L_k(z_k) = \ell_k(z_k - z_{k-1}) + \ell_{k+1}(z_k - z_{k+1}) \quad (A.17)$$

onde

$$\ell_k = \frac{2}{\frac{\Delta z_{k-1}}{\bar{D}_{k-1}} + \frac{\Delta z_k}{\bar{D}_k}} \quad (A.18)$$

$$\ell_{k+1} = \frac{2}{\frac{\Delta z_k}{\bar{D}_k} + \frac{\Delta z_{k+1}}{\bar{D}_{k+1}}}$$

De posse da expressão para a fuga na malha k podemos escrever (A.2) na forma discretizada

$$\begin{aligned} -\ell_k Z_{k-1} + \left[\ell_k + \ell_{k+1} + (\bar{\Sigma}_{a_k} + \bar{\Sigma}_{\ell_k}) \Delta z_k \right] Z_k - \\ - \ell_{k+1} Z_{k+1} = \frac{1}{k} \overline{v\Sigma_f} \Delta z_k Z_k \end{aligned} \quad (A.19)$$

A equação acima é utilizada na formulação diferencial da síntese descontínua, na qual os parâmetros ponderados são escalares. Quando procuramos discretizar a equação na variável axial que aparece na formulação diferencial da síntese contínua, surge, entretanto, uma dificuldade, que é o fato de que, para este tipo de síntese e formulação, os parâmetros ponderados são matrizes, e não mais escalares. O cálculo deve então ser modificado, para que esta característica seja levada em conta.

Na Equação (A.1) os parâmetros ponderados ficam na forma matricial, como visto na seção 2 do Capítulo II:

$$\begin{aligned} \bar{D} = \begin{vmatrix} \bar{D}_{11} & \bar{D}_{12} \\ \bar{D}_{21} & \bar{D}_{22} \end{vmatrix} \quad \bar{\Sigma}_a = \begin{vmatrix} \bar{\Sigma}_{a11} & \bar{\Sigma}_{a12} \\ \bar{\Sigma}_{a21} & \bar{\Sigma}_{a22} \end{vmatrix} \\ \bar{\Sigma}_\ell = \begin{vmatrix} \bar{\Sigma}_{\ell11} & \bar{\Sigma}_{\ell12} \\ \bar{\Sigma}_{\ell21} & \bar{\Sigma}_{\ell22} \end{vmatrix} \quad \frac{1}{\overline{v\Sigma_f}} = \begin{vmatrix} \overline{v\Sigma_{f11}} & \overline{v\Sigma_{f12}} \\ \overline{v\Sigma_{f21}} & \overline{v\Sigma_{f22}} \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (A.20)$$

e $Z(z)$ passa a ser um vetor formado pelas duas funções axiais tal que

$$Z(z) = \begin{bmatrix} Z^1(z) \\ Z^2(z) \end{bmatrix} \quad (A.21)$$

As integrais em (A.3) e (A.4) são aproximadas por

$$\int (\bar{\Sigma}_a + \bar{\Sigma}_\ell) Z(z) dz \approx \Delta z_k \begin{bmatrix} \bar{\Sigma}_{a_{k11}} + \bar{\Sigma}_{\ell_{k11}} & \bar{\Sigma}_{a_{k12}} + \bar{\Sigma}_{\ell_{k12}} \\ \bar{\Sigma}_{a_{k21}} + \bar{\Sigma}_{\ell_{k21}} & \bar{\Sigma}_{a_{k22}} + \bar{\Sigma}_{\ell_{k22}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Z_k^1 \\ Z_k^2 \end{bmatrix} \quad (A.22)$$

$$\int \bar{\Sigma}_f Z(z) dz \approx \Delta z_k \begin{bmatrix} \bar{\Sigma}_{f_{k11}} & \bar{\Sigma}_{f_{k12}} \\ \bar{\Sigma}_{f_{k21}} & \bar{\Sigma}_{f_{k22}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Z_k^1 \\ Z_k^2 \end{bmatrix} \quad (A.23)$$

e os termos de fuga assumem a forma

$$L_k(z_{k-1}) = \frac{2}{\Delta z_k} \left\{ \begin{bmatrix} \bar{D}_{k11} & \bar{D}_{k12} \\ \bar{D}_{k21} & \bar{D}_{k22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Z_k^1 \\ Z_k^2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \psi_{k-1}^1 \\ \psi_{k-1}^2 \end{bmatrix} \right\} \quad (A.24)$$

$$\bar{L}_k(z_k) = \frac{2}{\Delta z_k} \cdot \left\{ \begin{array}{cc} \bar{D}_{k11} & \bar{D}_{k12} \\ \bar{D}_{k21} & \bar{D}_{k22} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{c} z_k^1 \\ z_k^2 \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{c} \psi_k^1 \\ \psi_k^2 \end{array} \right\} \quad (A.25)$$

onde ψ_{k-1}^1 e ψ_{k-1}^2 são os valores das funções $Z^1(z)$ e $Z^2(z)$ no ponto z_{k-1} e ψ_k^1 e ψ_k^2 são os valores destas funções no ponto z_k .

Refazendo os cálculos de modo similar ao já exposto, chegamos aos termos de fuga matriciais para a malha k:

$$\bar{L}_k(z_{k-1}) = \bar{\ell}_k(z_k - z_{k-1}) \quad (A.26)$$

$$\bar{L}_k(z_k) = \bar{\ell}_{k+1}(z_k - z_{k+1}) \quad (A.27)$$

onde

$$\bar{\ell}_k = \frac{2}{\Delta z_k \Delta z_{k-1}} \bar{D}_k \left| \frac{\bar{D}_k}{\Delta z_k} + \frac{\bar{D}_{k-1}}{\Delta z_{k-1}} \right|^{-1} \bar{D}_{k-1} \quad (A.28)$$

$$\bar{\ell}_k = \frac{2}{\Delta z_k \Delta z_{k+1}} \bar{D}_{k+1} \left| \frac{\bar{D}_{k+1}}{\Delta z_{k+1}} + \frac{\bar{D}_k}{\Delta z_k} \right|^{-1} \bar{D}_k \quad (A.29)$$

$$\bar{D}_{k+S} = \begin{vmatrix} \bar{D}_{k+S11} & \bar{D}_{k+S12} \\ \bar{D}_{k+S21} & \bar{D}_{k+S22} \end{vmatrix}$$

$$Z_{k+S} = \begin{bmatrix} Z_{k+S}^1 \\ Z_{k+S}^2 \end{bmatrix} \quad \text{para } S = \begin{cases} -1 \\ 0 \\ 1 \end{cases}$$

A forma da equação discretizada é basicamente a mesma dada por (A.19), com a ressalva de que os termos de fuga e parâmetros ponderados passam a ser matrizes e os Z_{k-1} , Z_k , Z_{k+1} se tornam vetores de duas componentes.

Como a discretização por diferenças finitas já aplica a condição de continuidade, resta apenas estabelecer as condições de contorno adequadas ao problema a ser resolvido.

Por conveniência, faremos os cálculos a seguir representando os parâmetros ponderados por matrizes e os valores das funções em cada ponto por vetores, como requer a síntese contínua. Os resultados obtidos serão válidos, com as devidas modificações, para síntese descontínua.

i) Condição de contorno à esquerda: $z = 0$

Para a primeira malha em z temos a expressão para a fuga à esquerda ($z_0 = 0$)

$$\bar{L}_1(z_0) = C_e I \psi_0 \quad (\text{A.30})$$

onde

I é matriz identidade

ψ_0 é o valor de $Z(z)$ no ponto $z = 0$ tal que

$$\psi_0 = \begin{bmatrix} Z^1(0) \\ Z^2(0) \end{bmatrix}$$

e C_e dá a condição de contorno a ser utilizada:

$$C_e = \begin{cases} 0 & \text{para corrente nula em } z = 0 \\ \infty & \text{para fluxo nulo em } z = 0 \end{cases}$$

Da equação (A.24) vem que

$$\bar{L}_1(z_0) = \frac{2}{\Delta z_1} \bar{D}_1(Z_1 - \psi_0) \quad (\text{A.31})$$

onde

$$Z_1 = \begin{bmatrix} Z_1^1 \\ Z_1^2 \end{bmatrix}$$

logo

$$C_e I \psi_0 = -\frac{2}{\Delta z_1} \bar{D}_1(Z_1 - \psi_0), \text{ e, portanto}$$

$$\psi_0 = \left(C_e I + \frac{2}{\Delta z_1} \bar{D}_1 \right)^{-1} \frac{2}{\Delta z_1} \bar{D}_1 Z_1 \quad (\text{A.32})$$

Substituindo (A.32) em (A.31) obtemos a fuga da malha 1 na extremidade à esquerda:

$$\bar{L}_1(z_0) = \frac{2}{\Delta z_1} \left(I + \frac{2}{C_e \Delta z_1} \bar{D}_1 \right)^{-1} \bar{D}_1 Z_1$$

Como a condição a ser empregada no problema é a de fluxo nulo em $z = 0$,

$$\bar{L}_1(z_0) = \lim_{c_e \rightarrow \infty} \left| \frac{2}{\Delta z_1} \left(I + \frac{2}{c_e \Delta z_1} \bar{D}_1 \right)^{-1} \bar{D}_1 z_1 \right| = \frac{2}{\Delta z_1} \bar{D}_1 z_1 \quad (A.33)$$

e a fuga total para a primeira malha fica

$$\bar{L}_1 = \bar{L}_1(0) + \bar{L}_1(z_1) = \frac{2}{\Delta z_1} \bar{D}_1 z_1 + \ell_2(z_1 - z_2) \quad (A.34)$$

onde

$$\ell_2 = \frac{2}{\Delta z_1 \Delta z_2} \bar{D}_2 \left| \frac{\bar{D}_2}{\Delta z_2} + \frac{\bar{D}_1}{\Delta z_1} \right|^{-1} \bar{D}_1$$

ii) Condição de contorno à direita: $z=h$

Para a última malha à direita a expressão para a fuga no ponto $z=h$ é

$$L_{Nk}(z_{Nk}) = c_d I \psi_{Nk} \quad (A.35)$$

onde

I - é matriz identidade

ψ_{Nk} - é o valor da função $Z(z)$ no ponto $z=h$ tal que

$$\psi_{Nk} = \begin{vmatrix} Z^1(h) \\ Z^2(h) \end{vmatrix}$$

e

c_d - dá a condição de contorno a ser utilizada, sendo

$$c_d = \begin{cases} 0 & \text{para corrente nula em } z=h \\ \infty & \text{para fluxo nulo em } z=h \end{cases}$$

Da Equação (A.25) temos que

$$\bar{L}_{Nk}(z_{Nk}) = \frac{2}{\Delta z_{Nk}} \bar{D}_{Nk}(z_{Nk} - \psi_{Nk}) \quad (A.36)$$

onde

$$z_{Nk} = \begin{bmatrix} z_{Nk}^1 \\ z_{Nk}^2 \end{bmatrix}$$

e pela comparação de (A.35) e (A.36) obtemos o valor de ψ_{Nk} :

$$\psi_{Nk} = \frac{2}{\Delta z_{Nk}} \left(c_d I + 2 \frac{\bar{D}_{Nk}}{\Delta z_{Nk}} \right)^{-1} \bar{D}_{Nk} z_{Nk} \quad (A.37)$$

Vemos então que a fuga da malha N_k na extremidade à direita é

$$\bar{L}_{Nk}(z_{Nk}) = \frac{2}{\Delta z_{Nk}} \left(I + \frac{2\bar{D}_{Nk}}{c_d \Delta z_{Nk}} \right)^{-1} \bar{D}_{Nk} z_{Nk}$$

a qual, aplicada a condição de fluxo nulo em $z=h$, se torna

$$\begin{aligned} \bar{L}_{Nk}(z_{Nk}) &= \lim_{c_d \rightarrow \infty} \left| \frac{2}{\Delta z_{Nk}} \left(I + \frac{2}{c_d \Delta z_{Nk}} \bar{D}_{Nk} \right)^{-1} \bar{D}_{Nk} z_{Nk} \right| = \\ &= \frac{2}{\Delta z_{Nk}} \bar{D}_{Nk} z_{Nk} \end{aligned} \quad (A.38)$$

O termo de fuga total para a última malha po de então ser calculado:

$$\begin{aligned} \bar{L}_{Nk} &= \bar{L}_{Nk}(z_{Nk-1}) + \bar{L}_{Nk}(h) = \bar{L}_{Nk}(z_{Nk} - z_{Nk-1}) + \\ &+ \frac{2}{\Delta z_{Nk}} \bar{D}_{Nk} z_{Nk} \end{aligned} \quad (A.39)$$

onde

$$\bar{L}_{Nk} = \frac{2}{\Delta z_{Nk} \Delta z_{Nk-1}} \bar{D}_{Nk} \left| \frac{\bar{D}_{Nk}}{\Delta z_{Nk}} + \frac{\bar{D}_{Nk-1}}{\Delta z_{Nk-1}} \right|^{-1} \bar{D}_{Nk-1}$$

A.2) - Um Grupo, Duas Dimensões

A primeira parte deste Apêndice descreve em detalhe as etapas que levam à equação de difusão a uma dimensão em sua forma discretizada. Nesta seção, onde serão mostrados os cálculos que conduzem à equação bidimensional discretizada, explicações repetitivas serão omitidas, sempre que isto não prejudique a clareza da exposição.

A partir da equação de difusão a duas dimensões e um grupo de energia

$$-\nabla \cdot D \nabla \phi(x, z) + \Sigma_a \phi(x, z) = \frac{1}{k} \nu \Sigma_f \phi(x, z) \quad (A.40)$$

obtemos, pela integração de cada termo no volume de uma malha bidimensional (i, k) (ver Fig. A.2), os seguintes termos:

$$\int \Sigma_a \phi(x, z) dz dx \approx \Sigma_{a_{ik}} \phi_{ik} \Delta x_i \Delta z_k \quad (A.41)$$

$$\int v \Sigma_f \phi(x,z) dx dz \approx v \Sigma_{f_{ik}} \phi_{ik} \Delta x_i \Delta x_k \quad (A.42)$$

onde $\Sigma_{a_{ik}}$ e $v \Sigma_{f_{ik}}$ são os valores dos parâmetros materiais correspondentes à malha (i,k),

ϕ_{ik} - é o valor da função $\phi(x,z)$ no centro da malha (i,k),

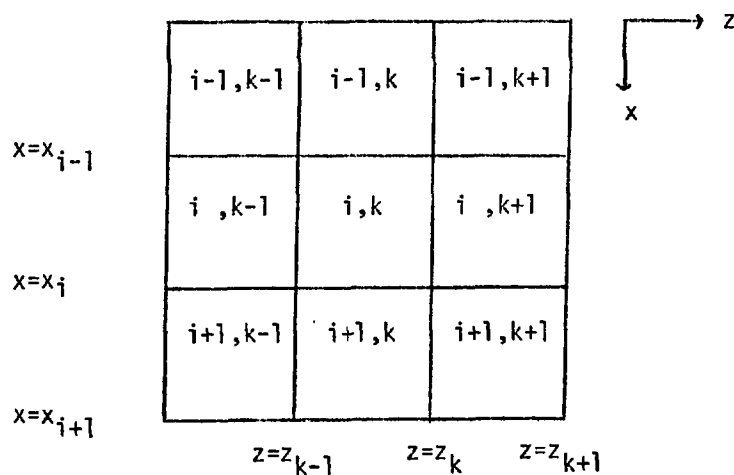
$$\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$$

$$\Delta z_k = z_k - z_{k-1}$$

$$e \quad - \int \nabla \cdot D \nabla \phi(x,z) dx dz = L_{ik} \quad (A.43)$$

onde L_{ik} é a fuga total na malha (i,k)

Fig. A.2 - Divisão em Malhas Bidimensionais



À semelhança de (A.8), calculamos a fuga total em uma malha pela soma das fugas da malha em questão para as malhas adjacentes (ver Fig. A.2):

$$L_{ik} = L_{ik}(x_{i-1}, z_k) + L_{ik}(x_i, z_k) + L_{ik}(x_i, z_{k-1}) + \\ + L_{ik}(x_i, z_k) \quad (A.44)$$

sendo

$$L_{ik}(x_{i-1}, z_k) = D_{ik} \frac{\phi_{ik} - \psi_{i-1,k}}{\frac{\Delta x_i}{2}} \Delta z_k \quad (A.45a)$$

$$L_{ik}(x_i, z_k) = D_{ik} \frac{\phi_{ik} - \psi_{ik}}{\frac{\Delta x_i}{2}} \Delta z_k \quad (A.45b)$$

$$L_{ik}(x_i, z_{k-1}) = D_{ik} \frac{\phi_{ik} - \psi_{i,k-1}}{\frac{\Delta z_k}{2}} \Delta x_i \quad (A.45c)$$

$$L_{ik}(x_i, z_k) = D_{ik} \frac{\phi_{ik} - \psi_{ik}}{\frac{\Delta z_k}{2}} \Delta x_i \quad (A.45d)$$

D_{ik} - coeficiente de difusão para a malha (i,k) ,

$\psi_{ik}, \psi_{i-1,k}, \psi_{i,k-1}$ - os valores da função $\phi(x,z)$ nos pontos (x_i, z_k) ,

(x_{i-1}, z_k) , (x_i, z_{k-1}) respectivamente

Relacionando a fuga na malha ik à fuga nas malhas adjacentes temos

$$L_{ik}(x_{i-1}, z_k) = - L_{i-1,k}(x_{i-1}, z_k) \quad (A.46a)$$

$$L_{ik}(x_i, z_k) = - L_{i+1,k}(x_i, z_k) \quad (A.46b)$$

$$L_{\underline{i}k} (x_i, z_{k-1}) = - L_{\underline{i},k-1} (x_i, z_{k-1}) \quad (A.46c)$$

$$L_{\underline{i}k} (x_i, z_k) = - L_{\underline{i},k+1} (x_i, z_k) \quad (A.46d)$$

onde

$$L_{i-1,\underline{k}} (x_{i-1}, z_k) = D_{i-1,k} \frac{\phi_{i-1,k} - \psi_{i-1,k}}{\frac{\Delta x_{i-1}}{2}} \Delta z_k \quad (A.47a)$$

$$L_{i+1,\underline{k}} (x_i, z_k) = D_{i+1,k} \frac{\phi_{i+1,k} - \psi_{i,k}}{\frac{\Delta x_{i+1}}{2}} \Delta z_k \quad (A.47b)$$

$$L_{\underline{i},k-1} (x_i, z_k) = D_{i,k-1} \frac{\phi_{i,k-1} - \psi_{i,k-1}}{\frac{\Delta z_{k-1}}{2}} \Delta x_i \quad (A.47c)$$

$$L_{\underline{i},k+1} (x_i, z_k) = D_{i,k+1} \frac{\phi_{i,k+1} - \psi_{i,k}}{\frac{\Delta z_{k+1}}{2}} \Delta x_i \quad (A.47d)$$

Avaliamos então a fuga total na malha (i,k) em função dos valores de $\phi(x,z)$ no centro desta malha e das malhas $(i-1,k)$, $(i+1,k)$, $(i,k-1)$ e $(i,k+1)$ pela soma dos termos a seguir:

$$L_{i\underline{k}} (x_{i-1}, z_k) = \ell_{|i-1,i|k} (\phi_{ik} - \phi_{i-1,k}) \quad (A.48a)$$

$$L_{i\underline{k}} (x_i, z_k) = \ell_{|i,i+1|k} (\phi_{ik} - \phi_{i+1,k}) \quad (A.48b)$$

$$L_{\underline{i}k} (x_i, z_{k-1}) = \ell_{i|k-1,k|} (\phi_{ik} - \phi_{i,k-1}) \quad (A.48c)$$

$$L_{\underline{i}k} (x_i, z_k) = \ell_{i|k,k+1|} (\phi_{ik} - \phi_{i,k+1}) \quad (A.48d)$$

nos quais

$$\begin{aligned} \ell_{|i-1,i|k} &\equiv \frac{2\Delta z_k}{\frac{\Delta x_{i-1}}{D_{i-1,k}} + \frac{\Delta x_i}{D_{ik}}} ; \ell_{|i,i+1|k} \equiv \frac{2\Delta z_k}{\frac{\Delta x_i}{D_{ik}} + \frac{\Delta x_{i+1}}{D_{i+1,k}}} \\ \ell_{i|k-1,k|} &\equiv \frac{2\Delta x_i}{\frac{\Delta z_{k-1}}{D_{i,k-1}} + \frac{\Delta z_k}{D_{ik}}} ; \ell_{i|k,k+1|} \equiv \frac{2\Delta x_i}{\frac{\Delta z_k}{D_{ik}} + \frac{\Delta z_{k+1}}{D_{i,k+1}}} \end{aligned} \quad (A.49)$$

Temos, finalmente, a forma discretizada de (A.40):

$$\begin{aligned} &\ell_{|i-1,i|k} (\phi_{ik} - \phi_{i-1,k}) + \ell_{|i,i+1|k} (\phi_{ik} - \phi_{i+1,k}) + \\ &+ \ell_{i|k-1,k|} (\phi_{ik} - \phi_{i,k-1}) + \ell_{i|k,k+1|} (\phi_{ik} - \phi_{i,k+1}) + \\ &+ \sum_{a_{ik}} \Delta x_i \Delta z_k \phi_{ik} = \frac{1}{\ell} v \sum_{f_{ik}} \Delta x_i \Delta z_k \phi_{ik} \end{aligned} \quad (A.50)$$

ã qual devemos ainda aplicar as condições de contorno que o problema requer.

i) Condições de contorno em x:

i.1) Derivada do fluxo nula na superfície $x = 0$

Para a extremidade mínima em x temos a condição para o termo de fuga

$$L_{1k}(0, z_k) = C_x^- \psi_{0,k} \quad (A.51)$$

no qual C_x^- deve ser nulo para derivada em relação a x nula em $x=0$, e $\psi_{0,k}$ é o valor para o fluxo na superfície $x=0$ de uma malha $(1,k)$ disposta ao longo desta superfície.

Logo, usando as definições já feitas, temos

$$D_{1k} = \frac{(\phi_{1k} - \psi_{0,k})}{\frac{\Delta x_1}{2}} \quad \Delta z_k = C_x^- \psi_{0,k} \quad (A.52)$$

e, portanto,

$$\psi_{0,k} = \frac{1}{\left[1 + \frac{\Delta x_1 C_x^-}{2 \Delta z_k D_{1k}} \right]} \phi_{1k} \quad (A.53)$$

Substituindo (A.53) em (A.51), temos

$$L_{1k}(0, z_k) = \frac{1}{\left[\frac{1}{C_x^-} + \frac{\Delta x_1}{2 \Delta z_k D_{1k}} \right]} \phi_{1,k} \quad (A.54)$$

Ao termo de fuga dado por (A.54) devemos aplicar a condição de derivada em x nula, ou seja, devemos fazer C_x^- tender a zero. Logo, a fuga na extremidade $x=0$ é

$$L_{1k}(0, z_k) = \lim_{C_x^- \rightarrow 0} \left| \frac{1}{\left[\frac{1}{C_x^-} + \frac{\Delta x_1}{2 \Delta z_k D_{1k}} \right]} \phi_{1k} \right| = 0 \quad (A.55)$$

(i.2) Fluxo nulo na superfície $x=b$

Para malhas na superfície $x=b$ a condição a ser imposta é

$$L_{Ni,k}(b, z_k) = C_x^+ \psi_{Ni,k} \quad (A.56)$$

onde

$\psi_{Ni,k}$ - é o fluxo na superfície $x=b$ de uma malha (Ni,k) disposta ao longo desta superfície, e C_x^+ deve tender a infinito para que o fluxo se anule em $x=b$.

De (A.56) e (A.45b) vem que

$$D_{Ni,k} \frac{\phi_{Ni,k} - \psi_{Ni,k}}{\frac{\Delta x_{Ni}}{2}} \Delta z_k = C_x^+ \psi_{Ni,k} \quad (A.57)$$

o que nos dá

$$\psi_{Ni,k} = \frac{1}{\left(1 + \frac{\Delta x_{Ni} C_x^+}{2 \Delta z_k D_{Ni,k}}\right)} \phi_{Ni,k} \quad (A.58)$$

e

$$L_{Ni,k} = \frac{1}{\left(\frac{1}{C_x^+} + \frac{\Delta x_{Ni}}{2 \Delta z_k D_{Ni,k}}\right)} \phi_{Ni,k} \quad (A.59)$$

Fazendo C_x^+ tender a infinito em (A.59) temos então

$$L_{Ni,k} = 2 D_{Ni,k} \frac{\Delta z_k}{\Delta x_j} \phi_{Ni,k} \quad (A.60)$$

Aplicadas as condições de contorno em x , de
vemos fazer o mesmo para os extremos em z .

ii) Condições de contorno em z :

ii.1) Fluxo nulo em $z = 0$

Para as malhas dispostas ao longo de $z = 0$
temos

$$L_{i,1}(x_i, 0) = C_z^- \psi_{i,0} \quad (A.61)$$

sendo

$\psi_{i,0}$ o valor de $\phi(x, z)$ no extremo $z = 0$ de uma malha $(i, 1)$

e

$C_z^- = \infty$ para fluxo nulo nesta extremidade.

De (A.61) e (A.45c), obtemos, após os cál-
culos necessários, a fuga na extremidade $z = 0$ da malha $(i, 1)$

$$L_{i,1}(x_i, 0) = \lim_{C_z^- \rightarrow \infty} \left| \frac{1}{\frac{1}{C_z^-} + \frac{\Delta z_1}{2 \Delta x_i D_{i,1}}} \phi_{i,1} \right| = 2 \frac{\Delta x_i}{\Delta z_1} D_{i,1} \phi_{i,1} \quad (A.62)$$

ii.2) Fluxo nulo em $z = h$

Para as malhas em $z = h$, devemos ter

$$L_{i,Nk}(x_i, h) = C_z^+ \psi_{i,Nk} \quad (A.63)$$

onde

$C_z^+ \rightarrow \infty$ para fluxo nulo em $z=h$

e

$\psi_{i,Nk}$ é o valor de $\phi(x,z)$ na extremidade $z=h$ da malha (i,Nk) .

De (A.63) e (A.45d) vem que

$$\psi_{i,Nk} = \frac{1}{1 + \frac{\Delta z_{Nk} C_z^+}{2 \Delta x_i D_{i,Nk}}} \phi_{i,Nk} \quad (A.64)$$

Substituindo (A.64) em (A.63) e aplicando a condição de fluxo nulo temos finalmente

$$\begin{aligned} L_{i,Nk}(x_i, h) &= \lim_{C_z^+ \rightarrow \infty} \left| \frac{1}{\frac{1}{C_z^+} + \frac{\Delta z_{Nk}}{2 \Delta x_i D_{i,Nk}}} \phi_{i,Nk} \right| = \\ &= 2 \frac{\Delta x_i}{\Delta z_{Nk}} D_{i,Nk} \phi_{i,Nk} \end{aligned} \quad (A.65)$$

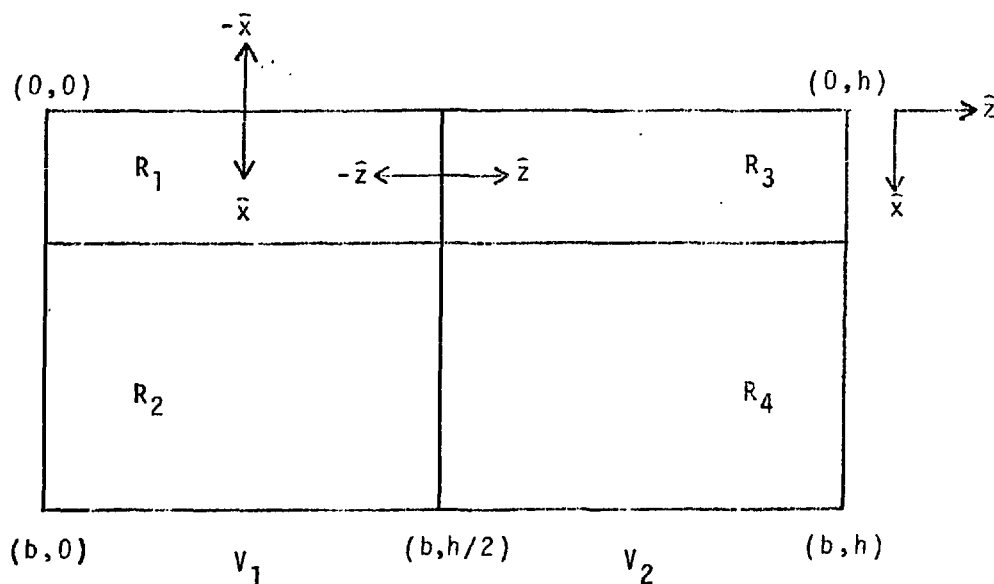
Ficam, então, perfeitamente definidos os termos de fuga para todas as malhas.

APÊNDICE B

MÉTODO VARIACIONAL PARA OBTENÇÃO DAS EQUAÇÕES DE SÍNTESE CONTÍNUA⁽¹⁹⁾

Seja o modelo de reator representado na Fig. (B.1).

Fig. B.1 - Modelo Utilizado



na qual as regiões materiais 1 e 2 compõem o que chamaremos de volume 1 (V_1 , bidimensional) e as regiões 3 e 4 compõem o volume 2 (V_2), com contornos S_1 e S_2 respectivamente, e sendo \hat{x} e \hat{z} vetores unitários.

A aproximação de síntese contínua para o fluxo em todo o reator é dada por

$$\tilde{\Phi}(x,z) = H^1(x)Z^1(z) + H^2(x)Z^2(z) \quad (B.1)$$

na qual $H^1(x)$ e $H^2(x)$ são funções-teste, e Z^1 e Z^2 funções axiais.

Desejamos encontrar equações para $\tilde{\phi}$ tais que (B.1) seja solução da equação de difusão

$$M\phi = -\nabla \cdot D\nabla\phi + \Sigma_a\phi - \frac{1}{k} \nu \Sigma_f\phi = 0 \quad (B.2)$$

aplicada a este modelo de reator.

Construimos então o funcional de η e ϕ

$$F[\eta, \phi] = (\phi, M\phi)_{x,z} + (\eta, (D\nabla_z\phi)_- - (D\nabla_z\phi)_+)_{x, \frac{h}{2}} \quad (B.3)$$

no qual $(\dots)_{x,z}$ denota integração em x, z e $(\dots)_-$ e $(\dots)_+$ denotam os valores das expressões à esquerda e à direita da interface em $z = h/2$ respectivamente, e no qual D e $\nabla\phi$ são seccionalmente contínuos.

Para que sejam obtidas equações para as funções ϕ e η devemos calcular a variação total do funcional dado por (B.3), a qual deverá ser nula para todos os valores possíveis de $\delta\phi$ e $\delta\eta$.

Sendo

$$\begin{aligned} \delta F = & (\delta\phi, M\phi)_{x,z} + (\phi, M\delta\phi)_{x,z} + (\delta\eta, (D\nabla_z\phi)_- - \\ & - (D\nabla_z\phi)_+)_{x, \frac{h}{2}} + (\eta, (D\nabla_z\delta\phi)_- - (D\nabla_z\delta\phi)_+)_{x, \frac{h}{2}} \end{aligned} \quad (B.4)$$

a variação total do funcional dado por (B.3). No segundo termo temos:

$$\phi \nabla \cdot (D \nabla \delta \phi) = \nabla \cdot (\phi D \nabla \delta \phi) - \nabla \phi \cdot (D \nabla \delta \phi) \quad (B.5)$$

mas

$$(\nabla \phi) \cdot (D \nabla \delta \phi) = D \nabla \phi \cdot \nabla \delta \phi = \nabla \cdot (\delta \phi D \nabla \phi) - \delta \phi \nabla \cdot (D \nabla \phi) \quad (B.6)$$

logo

$$\phi \nabla \cdot (D \nabla \delta \phi) = \nabla \cdot (\phi D \nabla \delta \phi) - \nabla \cdot (\delta \phi D \nabla \phi) + \delta \phi \nabla \cdot (D \nabla \phi) \quad (B.7)$$

Integrando (B.7) no volume total $V = V_1 + V_2$ e aplicando o teorema de Gauss temos

$$\begin{aligned} \int_V \phi \nabla \cdot (D \nabla \delta \phi) dV &= \int_V \delta \phi \nabla \cdot (D \nabla \phi) dV + \oint_S (\phi D \nabla \delta \phi) \cdot d\vec{S} - \\ &- \oint_S (\delta \phi D \nabla \phi) \cdot d\vec{S} \end{aligned} \quad (B.8)$$

onde S é a superfície correspondente ao volume V tal que $S = S_1 + S_2$

Para o volume V_1 o fluxo se anula nas superfícies $x=b$ e $z=0$; nas outras duas superfícies $x=0$ e $z=\frac{h}{2}$ temos respectivamente

$$d\vec{S}_1 = -dz\vec{x} \quad \text{e} \quad d\vec{S}_1 = dx\vec{z};$$

para o volume V_2 o fluxo se anula em $x=b$ e $z=h$, e para $x=0$ e $z=\frac{h}{2}$ temos respectivamente.

$$d\vec{S}_2 = -dz\hat{x} \quad \text{e} \quad d\vec{S}_2 = -dx\hat{z}$$

Logo, para V_1 temos

$$\oint_{S_1} (\phi D\nabla\delta\phi) \cdot d\vec{S} = - \int_{x=0} (\phi D\nabla_x \delta\phi) dz + \int_{z=\frac{h}{2}} (\phi D\nabla_z \delta\phi)_{-} dx \quad (\text{B.9})$$

Por ser $x=0$ eixo de simetria temos

$$\nabla_x \phi \Big|_{x=0} = 0, \quad \text{logo} \quad \nabla_x \delta\phi \Big|_{x=0} = 0 \quad (\text{B.10})$$

e, portanto a Eq. (B.9) se reduz a

$$\oint_{S_1} (\phi D\nabla\delta\phi) \cdot d\vec{S} = \int_{z=\frac{h}{2}} (\phi D\nabla_z \delta\phi)_{-} dx \quad (\text{B.11})$$

Também para V_1 temos

$$\oint_{S_1} (\delta\phi D\nabla\phi) \cdot d\vec{S} = - \int_{x=0} (\delta\phi D\nabla_x \phi) dz + \int_{z=\frac{h}{2}} (\delta\phi D\nabla_z \phi)_{-} dx$$

que, por (B.10) se reduz a

$$\oint_{S_1} (\delta\phi D\nabla\phi) \cdot d\vec{S} = \int_{z=\frac{h}{2}} (\delta\phi D\nabla_z \phi)_{-} dx \quad (\text{B.12})$$

Analogamente, para o volume V_2 temos

$$\oint_{S_2} (\phi D\nabla\delta\phi) \cdot d\vec{S} = - \int_{z=\frac{h}{2}} (\phi D\nabla_z \delta\phi)_{+} dx \quad (\text{B.13})$$

e

$$\oint_{S_2} (\delta\phi D\nabla\phi) \cdot d\vec{S} = - \int_{z=\frac{h}{2}} (\delta\phi D\nabla_z\phi)_+ dx \quad (B.14)$$

Podemos então reescrever (B.8) como

$$\begin{aligned} \int_V \phi \nabla \cdot (D\nabla\delta\phi) dV &= \int_V \delta\phi \nabla \cdot (D\nabla\phi) dV + \int_{z=\frac{h}{2}} \left| (\phi D\nabla_z\delta\phi)_- - \right. \\ &\quad \left. - (\phi D\nabla_z\delta\phi)_+ \right| dx - \int_{z=\frac{h}{2}} \left| (\delta\phi D\nabla_z\phi)_- - \right. \\ &\quad \left. - (\delta\phi D\nabla_z\phi)_+ \right| dx \equiv (\delta\phi, \nabla \cdot (D\nabla\phi))_{xz} + (\phi, (D\nabla_z\delta\phi)_- - \\ &\quad - (D\nabla_z\delta\phi)_+)_x \Big|_{z=\frac{h}{2}} - (\delta\phi, (D\nabla_z\phi)_- - (D\nabla_z\phi)_+)_x \Big|_{z=\frac{h}{2}} \end{aligned} \quad (B.15)$$

Mas como

$$(\phi, M\delta\phi)_{x,z} = - (\phi, \nabla \cdot D\nabla\delta\phi)_{x,z} + (\phi, (\Sigma_a - \frac{1}{k} \nu \Sigma_f) \delta\phi)_{x,z} \quad (B.16)$$

e sendo

$$(\phi, (\Sigma_a - \frac{1}{k} \nu \Sigma_f) \delta\phi)_{x,z} = (\delta\phi, (\Sigma_a - \frac{1}{k} \Sigma_f) \phi)_{x,z} \quad (B.17)$$

temos então

$$\begin{aligned} (\phi, M\delta\phi) &= - (\delta\phi, \nabla \cdot (D\nabla\phi)) - (\phi, (D\nabla_z\delta\phi)_- - \\ &\quad - (D\nabla_z\delta\phi)_+)_x \Big|_{z=\frac{h}{2}} + (\delta\phi, (D\nabla_z\phi)_- - D\nabla_z\phi)_+)_x \Big|_{z=\frac{h}{2}} + \\ &\quad + (\delta\phi, (\Sigma_a - \frac{1}{k} \nu \Sigma_f) \phi) = (\delta\phi, M\phi) - \\ &\quad - (\phi, (D\nabla_z\delta\phi)_- - (D\nabla_z\delta\phi)_+)_x \Big|_{z=\frac{h}{2}} + \end{aligned}$$

$$+ (\eta, (D\nabla_z \delta\phi)_- - (D\nabla_z \delta\phi)_+)_{z=\frac{h}{2}} \quad (B.19)$$

Como δF deve se anular para quaisquer ϕ e η , podemos escolher $\eta=\phi$, e portanto (B.19) se reduz a

$$\delta F|\phi| = 2(\delta\phi, M\phi) + 2(\delta\phi, (D\nabla_z \phi)_- - (D\nabla_z \phi)_+)_{z=\frac{h}{2}} \quad (B.20)$$

Pela aproximação de síntese contínua (B.1) aplicada a (B.20) temos

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \delta F|Z^1, Z^2| &= (H^1 \delta Z^1 + H^2 \delta Z^2, M(H^1 Z^1 + H^2 Z^2)) + \\ &+ (H^1 \delta Z^1 + H^2 \delta Z^2, (D\nabla_z (H^1 Z^1 + H^2 Z^2))_- - \\ &- (D\nabla_z (H^1 Z^1 + H^2 Z^2))_+)_{z=\frac{h}{2}} \end{aligned} \quad (B.21)$$

i) Fazendo $\delta F = 0$ para $\delta Z^1 = 0$ temos

$$\begin{aligned} 0 &= (H^2 \delta Z^2, M(H^1 Z^1 + H^2 Z^2)) + (H^2 \delta Z^2, D(H^1 \nabla_z Z^1 + H^2 \nabla_z Z^2))_- - \\ &- D(H^1 \nabla_z Z^1 + H^2 \nabla_z Z^2)_+)_{z=\frac{h}{2}}, \quad \forall \delta Z^2 \end{aligned} \quad (B.22)$$

ii) e fazendo $\delta F = 0$ para $\delta Z^2 = 0$, temos

$$\begin{aligned} 0 &= (H^1 \delta Z^1, M(H^1 Z^1 + H^2 Z^2)) + (H^1 \delta Z^1, D(H^1 \nabla_z Z^1 + \\ &+ H^2 \nabla_z Z^2))_- - D(H^1 \nabla_z Z^1 + H^2 \nabla_z Z^2)_+)_{z=\frac{h}{2}}, \quad \forall \delta Z^1 \end{aligned} \quad (B.23)$$

Logo, obtemos as equações para o fluxo aproximado por síntese contínua:

$$\begin{aligned} (H^1, M(H^1 Z^1 + H^2 Z^2))_x &= 0 \\ (H^2, M(H^1 Z^1 + H^2 Z^2))_x &= 0 \end{aligned} \quad (B.24)$$

e as condições para a interface $z = \frac{h}{2}$:

$$\begin{aligned} & (H^1, D(H^1 \nabla_z Z^1 + H^2 \nabla_z Z^2))_- - D(H^1 \nabla_z Z^1 + H^2 \nabla_z Z^2)_+ \Big|_{z=\frac{h}{2}} = 0 \\ e \quad & (H^2, D(H^1 \nabla_z Z^1 + H^2 \nabla_z Z^2))_- - D(H^1 \nabla_z Z^1 + H^2 \nabla_z Z^2)_+ \Big|_{z=\frac{h}{2}} = 0 \end{aligned} \quad (B.25)$$

APÊNDICE C

TABELAS E GRÁFICOS

Tabela (C.1) - Parâmetros Materiais para os Casos 1,2,3,4 e 5.

CASO	REGIÃO	$D(\text{cm}^{-1})$	$\Sigma_a(\text{cm}^{-1})$	$\nu\Sigma_f(\text{cm}^{-1})$	NÚMERO DE MALHAS CASO A		NÚMERO DE MALHAS CASO B		DIMENSÕES
					EM X	EM Z	EM X	EM Z	
1	1	1,000	0,150	0,1380	5	15	10	30	h = 60,00 cm a = 10,00 cm b-a= 20,00 cm
	2	1,000	0,100	0,1380	10	15	20	30	
	3	1,000	0,100	0,1110	5	15	10	30	
	4	1,000	0,150	0,1380	10	15	20	30	
2	1	0,500	0,150	0,1440	5	15	10	30	h = 60,00 cm a = 10,00 cm b-a= 20,00 cm
	2	2,000	0,100	0,1500	10	15	20	30	
	3	1,000	0,100	0,1080	5	15	10	30	
	4	0,500	0,150	0,1440	10	15	20	30	
3	1	0,500	0,200	0,0000	5	15	10	30	h = 10,00 cm a = 1,6667 cm b-a= 3,3333 cm
	2	2,000	0,100	1,1000	10	15	20	30	
	3	1,000	0,100	0,2000	5	15	10	30	
	4	0,500	0,200	0,0000	10	15	20	30	
4	1	0,500	0,140	0,1355	5	15	10	30	h = 60,00 cm a = 10,00 cm b-a= 20,00 cm
	2	2,000	0,100	0,1176	10	15	20	30	
	3	1,000	0,148	0,1430	5	15	10	30	
	4	0,500	0,100	0,1131	10	15	20	30	
5	1	1,000	0,150	0,1380	5	15	10	30	h = 60,00 cm a = 10,00 cm b-a= 20,00 cm
	2	1,000	0,100	0,1180	10	15	20	30	
	3	1,000	0,100	0,1110	5	15	10	30	
	4	1,000	0,150	0,1380	10	15	20	30	

Tabela (C.2) - Caso 1A $k_{eff}(TWODIM) = 1,11700$

SÍNTESE	k_{eff}	ERRO %	NÚMERO DE ITERAÇÕES	PROCESSADOR (s)	MEMÓRIA (Kwd)
Descontínua Diferencial	1,12971	1,13802	63	8	166
Descontínua Matricial	1,12695	$8,90746 \times 10^{-1}$	64	9	208
Contínua Diferencial	1,11973	$2,44121 \times 10^{-1}$	68	19	359
Contínua Matricial	1,11699	$1,13337 \times 10^{-3}$	69	18	373
Pseudo- Contínua	1,12291	$5,28972 \times 10^{-1}$	66	14	317

Tabela (C.2) - Caso 1B $k_{eff}(TWODIM) = 1,11520$

SÍNTESE	k_{eff}	ERRO %	NÚMERO DE ITERAÇÕES	PROCESSADOR (s)	MEMÓRIA (Kwd)
Descontínua Diferencial	1,12623	$9,89268 \times 10^{-1}$	64	12	287
Descontínua Matricial	1,12552	$9,25642 \times 10^{-1}$	64	17	420
Contínua Diferencial	1,11609	$8,00653 \times 10^{-2}$	69	36	1232
Contínua Matricial	1,11541	$1,84710 \times 10^{-2}$	69	32	1076
Pseudo- Contínua	1,12141	$5,57010 \times 10^{-1}$	65	18	609

Tabela (C.2) - Caso 2A $k_{eff}(CITATION) = 1,13346$

SÍNTESE	k_{eff}	ERRO %	NÚMERO DE ITERAÇÕES	PROCESSADOR (s)	MEMÓRIA (Kwd)
Descontínua Diferencial	1,13612	$2,34639 \times 10^{-1}$	54	8	182
Descontínua Matricial	1,13635	$2,54754 \times 10^{-1}$	55	11	281
Contínua Diferencial	1,13205	$1,24279 \times 10^{-1}$	63	17	346
Contínua Matricial	1,13289	$5,05909 \times 10^{-2}$	63	19	395
Pseudo- Contínua	1,13334	$1,08658 \times 10^{-2}$	58	14	492

Tabela (C.2) - Caso 2B $k_{eff}(CITATION) = 1,13094$

SÍNTESE	k_{eff}	ERRO %	NÚMERO DE ITERAÇÕES	PROCESSADOR (s)	MEMÓRIA (Kwd)
Descontínua Diferencial	1,13376	$2,49810 \times 10^{-1}$	54	11	245
Descontínua Matricial	1,13302	$1,84210 \times 10^{-1}$	55	16	586
Contínua Diferencial	1,12886	$1,83844 \times 10^{-1}$	64	29	806
Contínua Matricial	1,13010	$7,37812 \times 10^{-2}$	64	38	797
Pseudo- Contínua	1,13064	$2,66012 \times 10^{-2}$	58	17	497

Tabela (C.2) - Caso 3A $k_{eff}(CITATION) = 1,05516$

SÍNTESE	k_{eff}	ERRO %	NÚMERO DE ITERAÇÕES	PROCESSADOR (s)	MEMÓRIA (Kwd)
Descontínua Diferencial	1,08200	2,54327	12	7	160
Descontínua Matricial	1,07438	1,82126	12	10	257
Contínua Diferencial	1,05628	$1,05347 \times 10^{-1}$	10	14	396
Contínua Matricial	1,05262	$2,40870 \times 10^{-1}$	10	13	324
Pseudo- Contínua	1,05262	$2,41118 \times 10^{-1}$	12	11	259

Tabela (C.2) - Caso 3B $k_{eff}(TWODIM) = 1,05010$

SÍNTESE	k_{eff}	ERRO %	NÚMERO DE ITERAÇÕES	PROCESSADOR (s)	MEMÓRIA (Kwd)
Descontínua Diferencial	1,07435	2,30897	12	12	279
Descontínua Matricial	1,06861	1,76229	12	16	404
Contínua Diferencial	1,04706	$2,89252 \times 10^{-1}$	10	23	723
Contínua Matricial	1,04723	$2,73347 \times 10^{-1}$	10	23	710
Pseudo- Contínua	1,04888	$1,16564 \times 10^{-1}$	12	17	599

Tabela (C.2) - Caso 4A $k_{eff}(CITATION) = 1,01409$

SÍNTESE	k_{eff}	ERRO %	NÚMERO DE ITERAÇÕES	PROCESSADOR (s)	MEMÓRIA (Kwd)
Descontínua Diferencial	1,01574	$1,62394 \times 10^{-1}$	103	9	192
Descontínua Matricial	1,01468	$5,84273 \times 10^{-2}$	104	9	230
Contínua Diferencial	1,01466	$5,62295 \times 10^{-2}$	107	21	385
Contínua Matricial	1,01394	$1,44020 \times 10^{-2}$	105	22	415
Pseudo- Contínua	1,01348	$6,01732 \times 10^{-2}$	105	13	308

Tabela (C.2) - Caso 4B $k_{eff}(CITATION) = 0,01361$

SÍNTESE	k_{eff}	ERRO %	NÚMERO DE ITERAÇÕES	PROCESSADOR (s)	MEMÓRIA (Kwd)
Descontínua Diferencial	1,01457	$9,45414 \times 10^{-2}$	102	13	237
Descontínua Matricial	1,01421	$5,49006 \times 10^{-2}$	103	18	599
Contínua Diferencial	1,01349	$1,17236 \times 10^{-2}$	106	37	778
Contínua Matricial	1,01343	$1,73227 \times 10^{-2}$	106	38	907
Pseudo- Contínua	1,01337	$2,35983 \times 10^{-2}$	103	18	523

Tabela (C.2) - Caso 5A

$k_{eff}(TWODIM) = 0,99309$

SÍNTESE	k_{eff}	ERRO %	NÚMERO DE ITERAÇÕES	PROCESSADOR (s)	MEMÓRIA (Kwd)
Descontínua Diferencial	1,00874	1,57584	57	7	157
Descontínua Matricial	1,00750	1,45110	55	11	312
Contínua Diferencial	$9,93835 \times 10^{-1}$	$7,50059 \times 10^{-2}$	89	19	430
Contínua Matricial	$9,92945 \times 10^{-1}$	$1,46264 \times 10^{-2}$	86	18	418
Pseudo- Contínua	1,00314	1,01185	15	11	288

Tabela (C.2) - Caso 5B

$k_{eff}(TWODIM) = 0,99257$

SÍNTESE	k_{eff}	ERRO %	NÚMERO DE ITERAÇÕES	PROCESSADOR (s)	MEMÓRIA (Kwd)
Descontínua Diferencial	1,00720	1,47400	55	12	280
Descontínua Matricial	1,00689	1,44275	55	19	468
Contínua Diferencial	$9,92569 \times 10^{-1}$	$7,62133 \times 10^{-5}$	86	39	1304
Contínua Matricial	$9,92350 \times 10^{-1}$	$2,21684 \times 10^{-2}$	85	48	1414
Pseudo- Contínua	1,00162	$9,11450 \times 10^{-1}$	60	18	592

Tabela (C.3) - Variação do Autovalor com a Constante de Normalização para a Síntese Descontínua Diferencial

Caso 2A

$$k_{\text{eff}}(\text{CITATION}) = 1,13346$$

CONSTANTE DE NORMALIZAÇÃO	k_{eff}	ERRO %	NÚMERO DE ITERAÇÕES
0,1	1,17932	4,04572	26
0,2	1,17723	3,86174	30
0,3	1,17393	3,57002	33
0,4	1,16962	3,19016	36
0,5	1,16457	2,74480	39
0,6	1,15904	2,25669	42
0,7	1,15326	1,74645	45
0,8	1,14742	1,23119	48
0,9	1,14167	$7,24116 \times 10^{-1}$	51
1,0	1,13612	$2,34639 \times 10^{-1}$	54
1,1	1,13084	$2,31162 \times 10^{-1}$	56
1,2	1,12587	$6,69539 \times 10^{-1}$	59
1,3	1,12123	1,07896	62
1,4	1,11692	1,45920	65
1,5	1,11294	1,81096	68
1,6	1,10926	2,13552	71
1,7	1,10587	2,43460	73
1,8	1,10275	2,70982	76
1,9	1,09988	2,96310	79

Tabela (C .4) - Parâmetros Materiais e Funções-Teste para os Casos 6A, 7A e 8A

Parâmetros Materiais

REGIÃO	D(cm ⁻¹)	Σ_a (cm ⁻¹)	$v\Sigma_f$ (cm ⁻¹)	Nº DE MALHAS		DIMENSÕES
				EM X	EM Z	
1	1,000	0,1500000	0,1440	5	15	h = 60,00 cm a = 10,00 cm b-a= 20,00 cm
2	1,000	0,1500001	0,1440	10	15	
3	1,000	0,1500002	0,1440	5	15	
4	1,000	0,1500003	0,1440	10	15	

Funções-Teste

MALHA EM X	CASO 6A		Caso 7A		Caso 8A	
	H ¹ (cm ⁻² s ⁻¹)	H ² (cm ⁻² s ⁻¹)	H ¹ (cm ⁻² s ⁻¹)	H ² (cm ⁻² s ⁻¹)	H ¹ (cm ⁻² s ⁻¹)	H ² (cm ⁻² s ⁻¹)
1	35,88000	35,88000	35,89000	35,88950	35,89000	35,88985
2	35,49000	35,48000	35,50000	35,49950	35,50000	35,49985
3	34,71000	34,70000	34,72000	34,71950	34,72000	34,71985
4	33,54000	33,54000	33,56000	33,55950	33,56000	33,55985
5	32,01000	32,01000	32,03000	32,02950	32,03000	32,02985
6	30,13000	30,13000	30,15000	30,14950	30,15000	30,14985
7	27,92000	27,92000	27,94000	27,93950	27,94000	27,93985
8	25,40000	25,40000	25,42000	25,41950	25,42000	25,41985
9	22,61000	22,61000	22,63000	22,62950	22,63000	22,62985
10	19,57000	19,56000	19,58000	19,58000	19,58000	19,58000
11	16,31000	16,31000	16,32000	16,32000	16,32000	16,32000
12	12,88000	12,87000	12,88000	12,88000	12,88000	12,88000
13	9,30000	9,30000	9,31000	9,30950	9,31000	9,30985
14	5,62000	5,62000	5,62000	5,62000	5,62000	5,62000
15	1,88000	1,88000	1,88000	1,88000	1,88000	1,88000

Tabela (C.5) - Caso 6A $k_{\text{eff}}(\text{TWODIM}) = 9,42780 \times 10^{-1}$

SÍNTESE	k_{eff}	ERRO %	NÚMERO DE ITERAÇÕES	PROCESSADOR (s)	MEMÓRIA (Kwd)
Descontínua Diferencial	$9,42745 \times 10^{-1}$	$3,72788 \times 10^{-3}$	14	6	126
Descontínua Matricial	$9,42722 \times 10^{-1}$	$6,18497 \times 10^{-3}$	14	8	226
Contínua Diferencial	$9,42646 \times 10^{-1}$	$1,41896 \times 10^{-2}$	38	13	283
Contínua Matricial	$9,42579 \times 10^{-1}$	$2,13202 \times 10^{-2}$	96	19	382
Pseudo- Contínua	$9,43348 \times 10^{-1}$	$6,02159 \times 10^{-2}$	12	11	303

Tabela (C.6) - Teste de Convergência para Síntese Contínua Diferencial

Caso 6A

$$k_{\text{eff}}(\text{TWODIM}) = 9,42780 \times 10^{-1}$$

C	k_{eff}	ERRO %	NÚMERO DE ITERAÇÕES
0,10	$9,42875 \times 10^{-1}$	$1,01517 \times 10^{-2}$	61
0,15	$9,42903 \times 10^{-1}$	$1,31309 \times 10^{-2}$	58
0,20	$9,42748 \times 10^{-1}$	$3,32652 \times 10^{-3}$	58
0,25	$9,42687 \times 10^{-1}$	$9,76409 \times 10^{-3}$	148
0,30	$9,42913 \times 10^{-1}$	$1,41715 \times 10^{-2}$	308
0,35	$9,42831 \times 10^{-1}$	$5,42834 \times 10^{-3}$	285
0,40	$9,42788 \times 10^{-1}$	$8,95212 \times 10^{-4}$	75
0,45	$9,43024 \times 10^{-1}$	$2,59646 \times 10^{-2}$	140
0,50	$9,42702 \times 10^{-1}$	$8,19482 \times 10^{-3}$	276
0,55	$9,42331 \times 10^{-1}$	$4,75509 \times 10^{-2}$	169
0,60	$9,43540 \times 10^{-1}$	$8,07018 \times 10^{-2}$	04
0,65	$9,43731 \times 10^{-1}$	$1,00936 \times 10^{-1}$	21
0,70	$9,41110 \times 10^{-1}$	$1,77077 \times 10^{-1}$	147
0,71	-	-	não converge
0,72	$9,45102 \times 10^{-1}$	$2,46386 \times 10^{-1}$	333
0,73	$9,41920 \times 10^{-1}$	$9,11794 \times 10^{-2}$	476
0,74-0,75	-	-	não converge
0,76	$9,44184 \times 10^{-1}$	$1,49010 \times 10^{-1}$	172
0,77	-	-	não converge
0,78	$9,42119 \times 10^{-1}$	$7,00870 \times 10^{-2}$	82
0,79-0,82	-	-	não converge
0,83	$9,38548 \times 10^{-1}$	$4,48808 \times 10^{-1}$	154
0,84-0,85	-	-	não converge
0,86	$9,55164 \times 10^{-1}$	1,31366	343
0,87	$9,44619 \times 10^{-1}$	$1,95142 \times 10^{-1}$	266
0,88	$9,33711 \times 10^{-1}$	$9,61920 \times 10^{-1}$	147
0,89-0,99	-	-	não converge
1,00	-	-	erro de execução

Tabela (C.7) - Teste do Algoritmo de Ortogonalização das Funções-Teste para Síntese Contínua

$$k_{eff}(TWODIM) = 9,42780 \times 10^{-1}$$

SÍNTESE	CASO	k_{eff}	ERRO %	NÚMERO DE ITERAÇÕES	PROCESSADOR (s)	MEMÓRIA (Kwd)
Contínua Diferencial	7A	$9,42745 \times 10^{-1}$	$3,72794 \times 10^{-3}$	14	13	392
	8A	$9,42745 \times 10^{-1}$	$3,72784 \times 10^{-3}$	14	12	396
Contínua Matricial	7A	$9,42722 \times 10^{-1}$	$6,18457 \times 10^{-3}$	14	13	407
	8A	$9,42722 \times 10^{-1}$	$6,18390 \times 10^{-3}$	14	14	374

Tabela (C.8) - Variação nas Dimensões dos Codomínios da Síntese Pseudo-Contínua

Caso 2A

$$k_{\text{eff}}(\text{CITATION}) = 1,13346$$

NÚMERO DE MALHAS			k_{eff}	ERRO %	NÚMERO DE ITERAÇÕES
COD. 1	COD. 2	COD. 3			
2	26	2	1,11495	1,63309	64
3	24	3	1,11706	1,44697	63
4	22	4	1,11931	1,24846	63
5	20	5	1,12166	1,04106	62
6	18	6	1,12407	$8,28501 \times 10^{-1}$	62
7	16	7	1,12649	$6,15138 \times 10^{-1}$	61
8	14	8	1,12887	$4,05085 \times 10^{-1}$	60
9	12	9	1,13117	$2,02392 \times 10^{-1}$	59
10	10	10	1,13334	$1,08658 \times 10^{-2}$	58
11	8	11	1,13534	$1,66010 \times 10^{-1}$	57
12	6	12	1,13715	$3,25381 \times 10^{-1}$	56
13	4	13	1,13875	$4,66093 \times 10^{-1}$	55
14	2	14	1,13995	$5,71891 \times 10^{-1}$	55

Tabela (C.8) - Variação nas Dimensões dos Codomínios da Síntese Pseudo-Contínua

Caso 2A(1/8)

$$k_{\text{eff}}(\text{TWODIM}) = 2,90020 \times 10^{-1}$$

NÚMERO DE MALHAS			k_{eff}	ERRO %	NÚMERO DE ITERAÇÕES
COD. 1	COD. 2	COD. 3			
2	26	2	$3,12903 \times 10^{-1}$	7,89025	13
3	24	3	$3,12891 \times 10^{-1}$	7,88592	13
4	22	4	$3,12729 \times 10^{-1}$	7,83030	12
5	20	5	$3,12392 \times 10^{-1}$	7,71381	12
6	18	6	$3,11853 \times 10^{-1}$	7,52813	12
7	16	7	$3,11099 \times 10^{-1}$	7,26800	13
8	14	8	$3,10117 \times 10^{-1}$	6,92947	13
9	12	9	$3,08906 \times 10^{-1}$	6,51180	13
10	10	10	$3,07468 \times 10^{-1}$	6,01602	13
11	8	11	$3,05811 \times 10^{-1}$	5,44488	13
12	6	12	$3,03946 \times 10^{-1}$	4,80170	13
13	4	13	$3,01865 \times 10^{-1}$	4,08432	13
14	2	14	$2,99359 \times 10^{-1}$	3,22014	14

Tabela (C.8) - Variação nas Dimensões dos Codomínios da Síntese Pseudo-Contínua

Caso 4A

$$k_{eff}(CITATION) = 1,01409$$

NÚMERO DE MALHAS			k_{eff}	ERRO %	NÚMERO DE ITERAÇÕES
COD. 1	COD. 2	COD. 3			
2	26	2	1,01147	$2,58492 \times 10^{-1}$	103
3	24	3	1,01162	$2,43257 \times 10^{-1}$	104
4	22	4	1,01180	$2,25449 \times 10^{-1}$	104
5	20	5	1,01202	$2,04573 \times 10^{-1}$	104
6	18	6	1,01226	$1,80531 \times 10^{-1}$	104
7	16	7	1,01253	$1,53526 \times 10^{-1}$	104
8	14	8	1,01283	$1,23926 \times 10^{-1}$	105
9	12	9	1,01315	$9,25881 \times 10^{-2}$	105
10	10	10	1,01348	$6,01732 \times 10^{-2}$	105
11	8	11	1,01381	$2,74386 \times 10^{-2}$	105
12	6	12	1,01414	$4,85254 \times 10^{-3}$	104
13	4	13	1,01446	$3,63417 \times 10^{-2}$	104
14	2	14	1,01475	$6,55001 \times 10^{-2}$	104

Tabela (C.8) - Variação nas Dimensões dos Codomínios da Síntese Pseudo-Contínua

Caso 4A(1/4)

$$k_{\text{eff}}(\text{TWODIM}) = 6,23340 \times 10^{-1}$$

NÚMERO DE MALHAS			k_{eff}	ERRO %	NÚMERO DE ITERAÇÕES
COD. 1	COD. 2	COD. 3			
2	26	2	$6,47465 \times 10^{-1}$	3,87030	20
3	24	3	$6,47322 \times 10^{-1}$	3,84729	20
4	22	4	$6,47028 \times 10^{-1}$	3,80024	20
5	20	5	$6,46555 \times 10^{-1}$	3,72437	20
6	18	6	$6,45879 \times 10^{-1}$	3,61588	20
7	16	7	$6,44982 \times 10^{-1}$	3,47196	20
8	14	8	$6,43853 \times 10^{-1}$	3,29078	20
9	12	9	$6,42485 \times 10^{-1}$	3,07144	20
10	10	10	$6,40880 \times 10^{-1}$	2,81390	20
11	8	11	$6,39041 \times 10^{-1}$	2,51880	20
12	6	12	$6,36970 \times 10^{-1}$	2,18666	20
13	4	13	$6,34650 \times 10^{-1}$	1,81434	20
14	2	14	$6,31800 \times 10^{-1}$	1,35718	21

Tabela (C.8) - Variação nas Dimensões dos Codomínios da Síntese Pseudo-Contínua

Caso 4A(1/8)

$$k_{\text{eff}}(\text{TWODIM}) = 2,88810 \times 10^{-1}$$

NÚMERO DE MALHAS			k_{eff}	ERRO %	NÚMERO DE ITERAÇÕES
COD. 1	COD. 2	COD. 3			
2	26	2	$3,13512 \times 10^{-1}$	8,55989	13
3	24	3	$3,13345 \times 10^{-1}$	8,49503	13
4	22	4	$3,13012 \times 10^{-1}$	8,37997	13
5	20	5	$3,12481 \times 10^{-1}$	8,19611	13
6	18	6	$3,11726 \times 10^{-1}$	7,93455	13
7	16	7	$3,10728 \times 10^{-1}$	7,58915	13
8	14	8	$3,09479 \times 10^{-1}$	7,15650	13
9	12	9	$3,07975 \times 10^{-1}$	6,63588	13
10	10	10	$3,06223 \times 10^{-1}$	6,02911	13
11	8	11	$3,04233 \times 10^{-1}$	5,34011	13
12	6	12	$3,02019 \times 10^{-1}$	4,57355	13
13	4	13	$2,99577 \times 10^{-1}$	3,72806	13
14	2	14	$2,96683 \times 10^{-1}$	2,72590	14

Figura C.1 - Fluxos para o Caso 1A

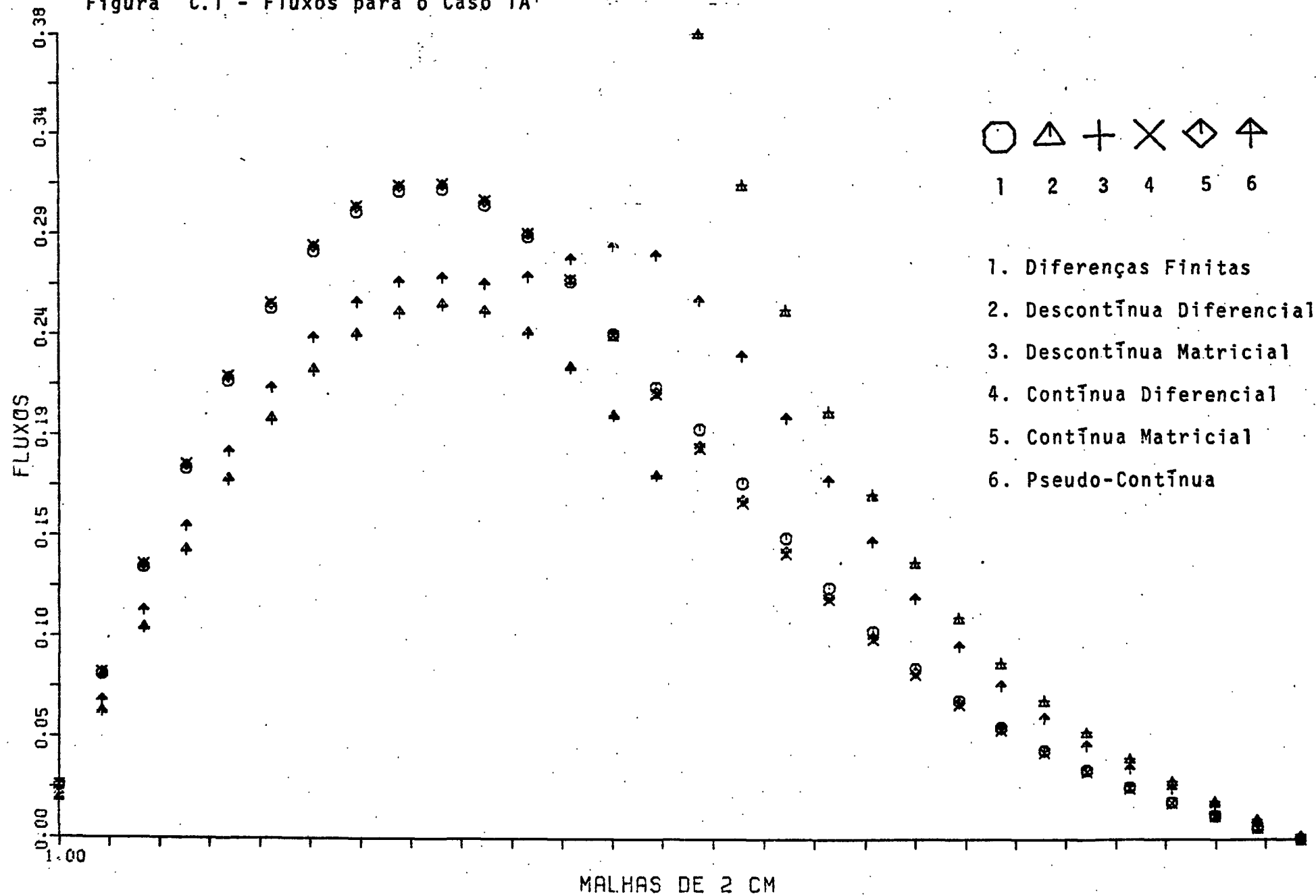
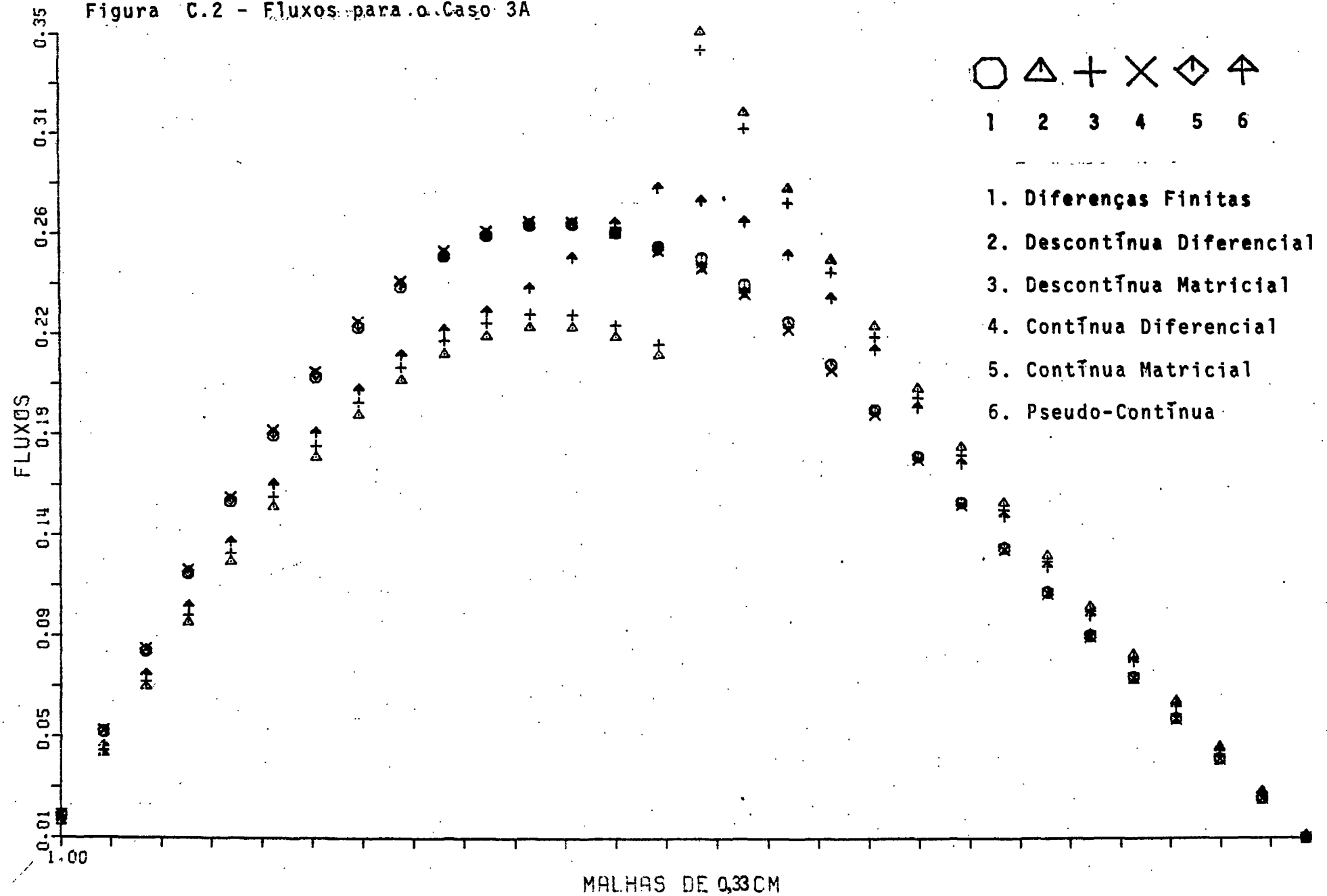


Figura C.2 - Fluxos para o Caso 3A



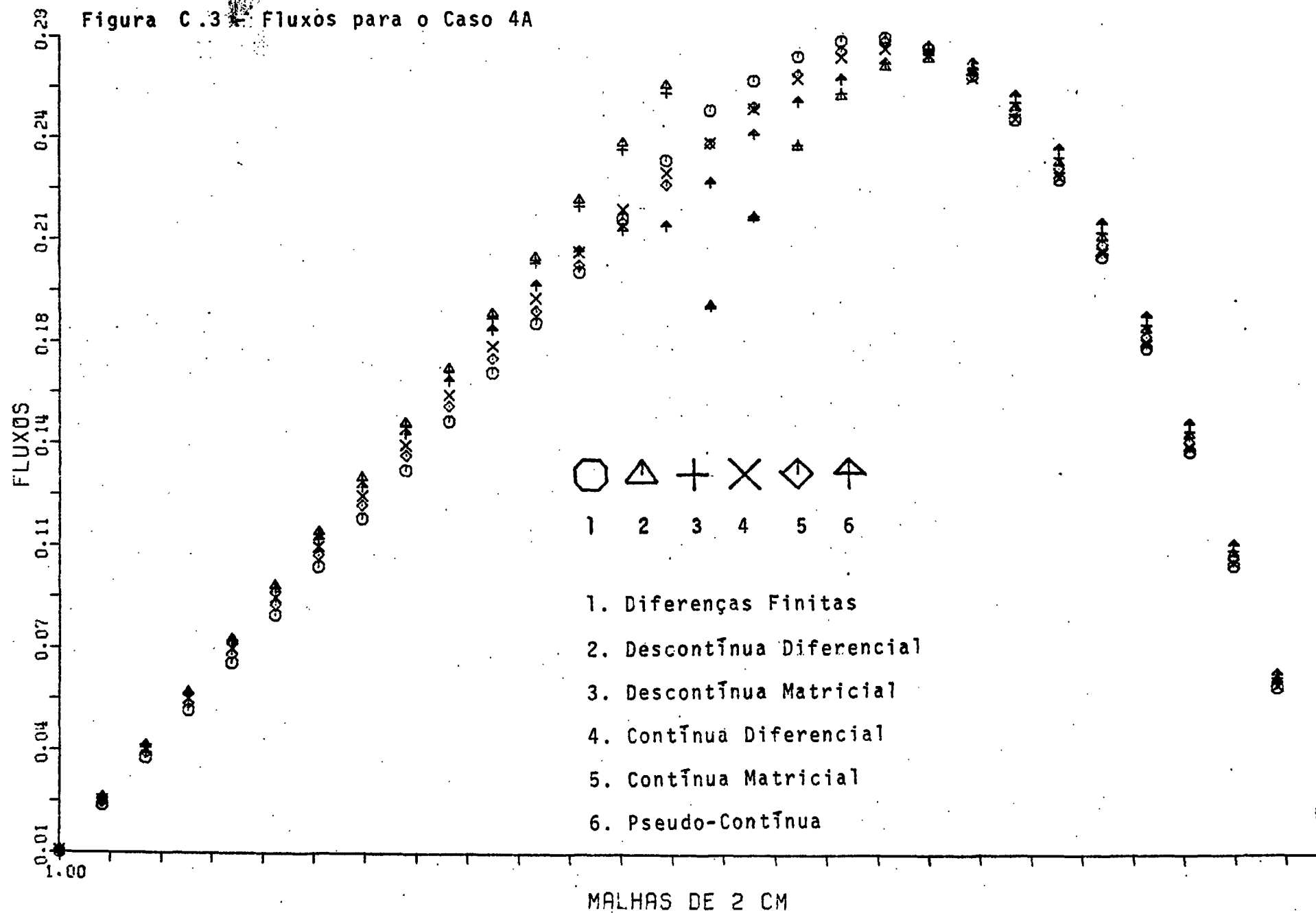


Figura C.4 - Variação do Autovalor com a Constante de Normalização

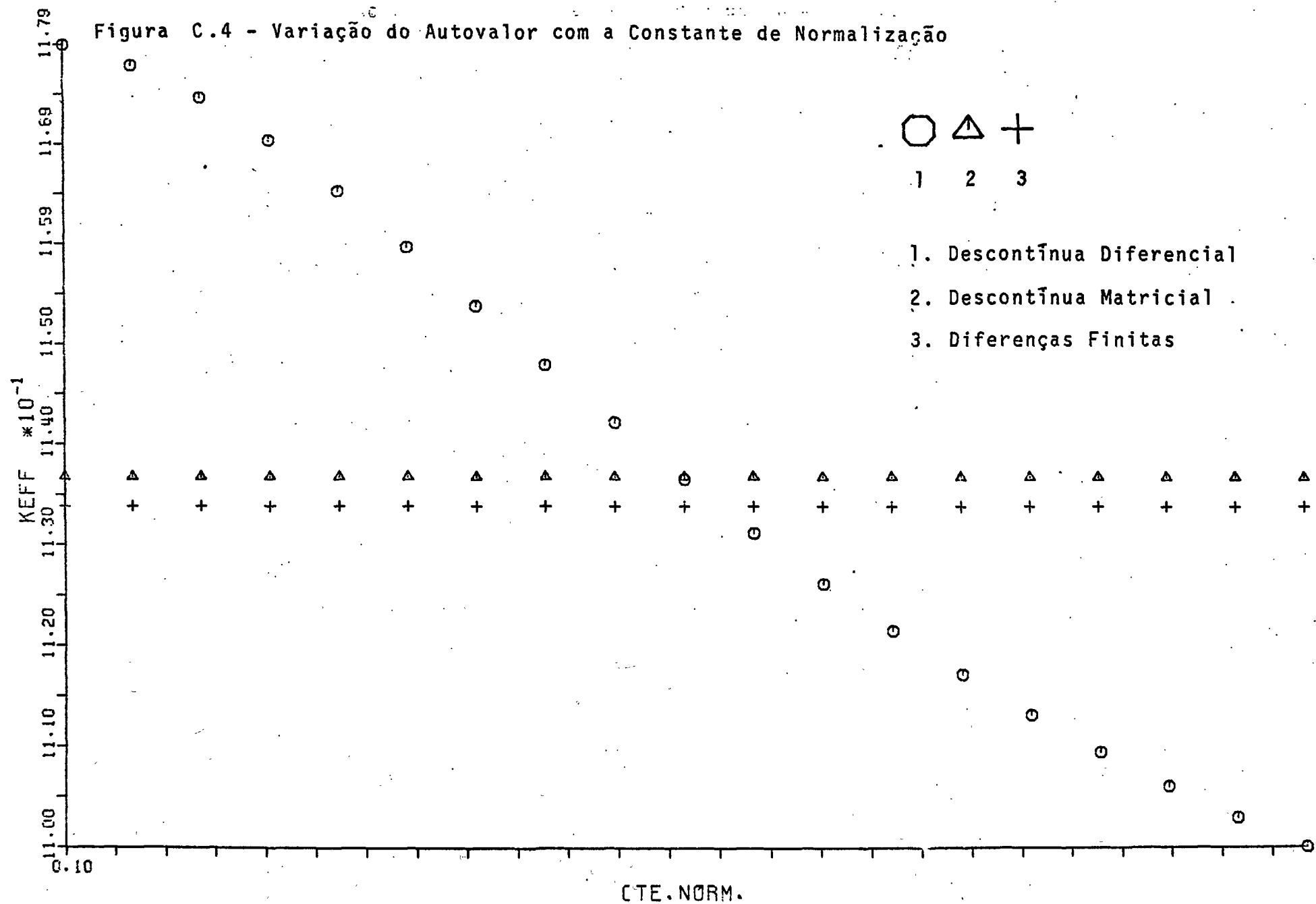
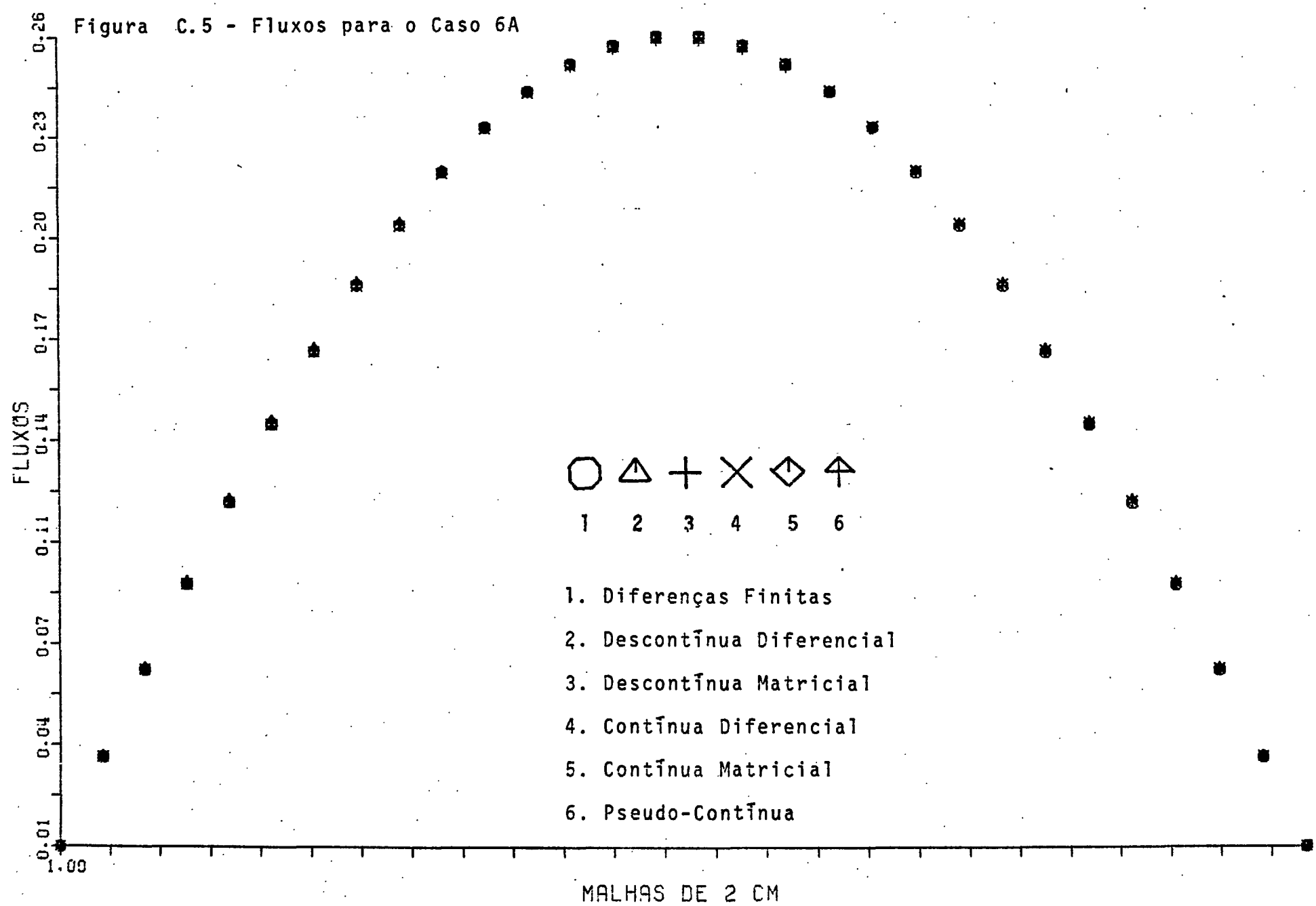


Figura C.5 - Fluxos para o Caso 6A



APENDICE D

PROGRAMAS

DESCONTINUA DIFERENCIAL

```

SUBROUTINE UMD(A,C,S,F,SN,B,R,INT,XK,N)
DIMENSION A(N,N),C(N,N),F(N),SN(N),R(N),B(N)
MAX=180
XK=C
ERR0=1.00E-06
SOMA=C
DO 69 I=1,N
F(I)=(1-I)*(N-I)
69 SOMA=SOMA+F(I)*F(I)
SNOR=SQRT(SOMA)
DO 70 I=1,N
70 F(I)=F(I)/SNOR
WRITE(6,16)(I,F(I),I=1,N)
16 FORMAT(/,10X,'F(',12,')=',E12.5)
INVERSAO DA MATRIZ POR ELIM. DE GAUSS
B(1)=A(1,2)/A(1,1)
M=N-1
DO 25 I=2,M
R(I)=A(I,1)-A(I,I-1)*B(I-1)
B(I)=A(I,I+1)/R(I)
25 CONTINUE
R(N)=A(N,N)-A(N,N-1)*B(N-1)
INT=0
5 XN=0
FONTE E KEFF
DO 1 J=1,N
S(J)=C(J)*F(J)
1 XN=XN+S(J)
WRITE(6,888)XN,INT
888 FORMAT(3X,'KEFF=',1PE12.5,3X,'ITERACAO NUMERO',2X,13)
CONVERGENCIA E NUMERO LIMITE DE ITERACOES
IF(ABS(XN-XK).LT.ERRO)GO TO 9
IF(INT.GT.MAX)GO TO 9
FONTE NORMALIZADA
DO 2 J=1,N
2 S(J)=S(J)/XN
SOLUCAO DO PROBLEMA UM-D-UM-G
SN(1)=S(1)/A(1,1)
DO 29 I=2,N
SN(I)=(S(I)-A(I,I-1)*SN(I-1))/R(I)
29 CONTINUE
F(N)=SN(N)
M=N-1
DO 30 I=1,M
J=N-I
30 F(J)=SN(J)-B(J)*F(J+1)
INT=INT+1
XK=XN
GO TO 5
8 WRITE(6,18)XK,INT
18 FORMAT(10X,'XK=',E12.5,10X,'INT=',13)
WRITE(6,19)(I,F(I),I=1,N)
19 FORMAT(10X,'F(',13,')=',E12.5)
GO TO 10

```

```

9 WRITE(6,20)INT
20 FORMAT(10X,'NAG CONVERGE',10X,13)
10 RETURN
END
DIMENSION SCAL(30),C(30),E(30),X(2,15),QUAX(15)
DIMENSION SCLM(30),GRADX(15)
DIMENSION AL(30,30),RL(30,30)
DIMENSION F(30),S(30),SN(30),R(30),B(30)
DIMENSION FLUXD(15,30),F1(30),F2(30),DIF(30)
READ(5,60)N,NN,NI,NII
60 FORMAT(4I2)
READ(5,67)(X(1,1),I=1,NI)
67 FORMAT(7E10,3)
READ(5,66)(X(2,1),I=1,NI)
66 FORMAT(7E10,3)
READ(5,68)D1,D2,D3,D4,SCA1,SCA2,SCA3,SCA4
68 FORMAT(8F5,3)
READ(5,61)SCF1,SCF2,SCF3,SCF4
61 FORMAT(4F6,4)
READ(5,62)XCIT
62 FORMAT(F9,7)
READ(5,63)DELX,DELY
63 FORMAT(2F4,2)
READ(5,888)OIV
888 FORMAT(F3,1)
DELX=DELX/DIV
DELY=DELY/DIV
DELX2=DELX+DELX
DELY2=2./DELY
SO1=0.
SO2=0.
DO 77 I=1,NI
SO1=SO1+X(1,1)*X(1,1)
SO2=SO2+X(2,1)*X(2,1)
77 SO1=SQRT(SO1)
RSO1=SQRT(SO2)
DO 78 I=1,NI
X(1,1)=X(1,1)/RSO1
X(2,1)=X(2,1)/RSO2
78 X(2,1)=X(2,1)/RSO2
WRITE(6,201)RSO1,RSO2
201 FORMAT(2X,'RSO1=',E12.5,2X,'RSO2=',E12.5)
IA=1
KI=1
KN=NN
SA1=SCA1
SF1=SCF1
DP1=D1
SA2=SCA2
SF2=SCF2
DP2=D2
DO 2 I=2,NI-1
QUAX(I)=X(IA,1)*X(IA,1)
GRADX(I)=(X(IA,1+1)-X(IA,1-1))/CELX2
GRADX(I)=GRADX(I)*GRADX(I)

```

```

QUAX(1)=X(IA,1)*X(IA,1)
QUAX(NI)=X(IA,NI)*X(IA,NI)
GRADX(1)=(X(IA,2)-X(IA,1))/DELY2
GRADX(1)=GRADX(1)*GRADX(1)
GRADX(NI)=(-X(IA,NI)-X(IA,NI-1))/DELY2
GRADX(NI)=GRADX(NI)*GRADX(NI)
DO 1 J=KI,KN
SCAM(J)=0.
C(J)=0.
SCLM(J)=0.
O(J)=0.
SOMA1=0.
SOMA2=0.
SOMA3=0.
SOMA4=0.
DO 3 I=1,NII
SOMA1=SOMA1+DP1*GRADX(I)
SOMA2=SOMA2+SA1*QUAX(I)
SOMA3=SOMA3+SF1*QUAX(I)
3 SOMA4=SOMA4+DP1*QUAX(I)
DO 4 I=NII+1,NI
SOMA1=SOMA1+DP2*GRADX(I)
SOMA2=SOMA2+SA2*QUAX(I)
SOMA3=SOMA3+SF2*QUAX(I)
4 SOMA4=SOMA4+DP2*QUAX(I)
C(J)=C(J)+SOMA3
C(J)=C(J)*DELY
SCAM(J)=SCAM(J)+SOMA2
SCLM(J)=SCLM(J)+SOMA1
1 D(J)=D(J)+SOMA4
C*****TESTE DE RETORNO DO PROGRAMA*****
IF(IA.EQ.2)GO TO 200
IA=2
KI=NN+1
KN=N
SA1=SCA3
SF1=SCF3
DP1=D3
SA2=SCA4
SF2=SCF4
DP2=D4
GO TO 100
200 RL1=DELY2*D(1)
RLN=DELY2*D(N)
DO 29 K=2,N-1
RL(K-1,K)=DELY2*(1./(1./D(K)+1./D(K-1)))
29 RL(K+1,K)=DELY2*(1./(1./D(K)+1./D(K+1)))
DO 10 J=1,N
DO 10 JK=1,N
10 A(J,JK)=0.
A(1,1)=RL(1,2)+RL1+DELY*(SCAM(1)+SCLM(1))
A(1,2)=-RL(1,2)
A(2,1)=-RL(1,2)
A(N,N)=RL(N,N-1)+RLN+DELY*(SCAM(N)+SCLM(N))

```

```

DO 20 J=2,N-1
A(J,J)=RL(J-1,J)+RL(J+1,J)+DELY*(SCAM(J)+SCLM(J))
A(J,J+1)=-RL(J+1,J)
20 A(J+1,J)=-RL(J+1,J)
READ(5,889)ICASO
889 FORMAT(I1)
WRITE(6,890)ICASO
890 FORMAT(/,20X,'CASO ',I1,/)
CALL UMD(A,C,S,F,SN,B,R,INT,XK,N)
WRITE(6,110)
WRITE(6,111)
WRITE(6,112)XK,XCIT
WRITE(6,113)
ABSOL=ABS(XK-XCIT)
RELAT=ABSOL/XCIT
PERCT=RELAT*100
WRITE(6,114)ABSOL,RELAT,PERCT
110 FORMAT(/,20X,'COMPARACAO COM RESULTADO DIF. FINITAS KEFF',/
)
111 FORMAT(/,10X,'KEFF DA SINTESE',10X,'KEFF DE DIF. FINITAS',/
)
112 FORMAT(10X,1PE12.5,12X,1PE12.5)
113 FORMAT(/,10X,'ERRO ABSOLUTO',5X,'ERRO RELATIVO',5X,'ERRO
/PERCENTUAL')
114 FORMAT(/,10X,1PE12.5,6X,1PE12.5,5X,1PE12.5//)
WRITE(6,700)
700 FORMAT(/,9X,'***** SINTESE DESCONTINUA *****
',/)
WRITE(6,701)
701 FORMAT(/,9X,'PARAMETROS MATERIAIS',10X,'MALHAS LIMI-
TROFES',/
)
WRITE(6,702)
702 FORMAT(/,1X,'REGIÃO',2X,'SCA',6X,'C',8X,'SCF',9X,'EIXO X',2
X,'EIXO
/ Y',/)
WRITE(6,703)SCA1,D1,SCF1,NII,NN
703 FORMAT(/,4X,'1',4X,F5.3,4X,F5.3,4X,F6.4,6X,' 1',2X,I2,2X,'
1',2X,I
/2)
NA=NII+1
WRITE(6,704)SCA2,D2,SCF2,NA,NI,NN
704 FORMAT(/,4X,'2',4X,F5.3,4X,F5.3,4X,F6.4,6X,I2,2X,I2,2X,' 1'
,2X,I2)
NAA=NN+1
WRITE(6,705)SCA3,D3,SCF3,NII,NAA,N
705 FORMAT(/,4X,'3',4X,F5.3,4X,F5.3,4X,F6.4,6X,' 1',2X,I2,2X,I2
,2X,I2)
WRITE(6,706)SCA4,D4,SCF4,NA,NI,NAA,N
706 FORMAT(/,4X,'4',4X,F5.3,4X,F5.3,4X,F6.4,6X,I2,2X,I2,2X,I2,2
X,I2,/)
WRITE(6,707)
707 FORMAT(/,9X,'DIMENSÃO DA MALHA',/)
WRITE(6,708)DELX
708 FORMAT(9X,'EM X',2X,F4.2,2X,'CM',/)

```

```
WRITE(6,709)DELY
709 FORMAT(9X,'EM Y',2X,F4.2,2X,'CM',//)
DO 507 I=1,NI
DO 507 J=1,NV
507 FLUX0(I,J)=X(1,I)*F(J)
DO 508 I=1,NI
DO 508 J=NN+1,N
508 FLUX0(I,J)=X(2,I)*F(J)
WRITE(6,602)
602 FORMAT(/,20X,'1',13X,'2',13X,'3',13X,'4',13X,'5',13X,'6',/)
DO 603 I=1,NI
WRITE(6,604)I,(FLUX0(I,J),J=1,6)
604 FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),/)
603 CONTINUE
WRITE(6,605)
605 FORMAT(/,20X,'7',13X,'8',13X,'9',12X,'10',12X,'11',12X,'12',
/)
DO 606 I=1,NI
WRITE(6,607)I,(FLUX0(I,J),J=7,12)
607 FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),/)
606 CONTINUE
WRITE(6,608)
608 FORMAT(/,19X,'13',12X,'14',12X,'15',12X,'16',12X,'17',12X,'
18',/)
DO 609 I=1,NI
WRITE(6,610)I,(FLUX0(I,J),J=13,18)
610 FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),/)
609 CONTINUE
WRITE(6,620)
620 FORMAT(/,19X,'19',12X,'20',12X,'21',12X,'22',12X,'23',12X,'
24',/)
DO 621 I=1,NI
WRITE(6,622)I,(FLUX0(I,J),J=19,24)
622 FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),/)
621 CONTINUE
WRITE(6,623)
623 FORMAT(/,19X,'25',12X,'26',12X,'27',12X,'28',12X,'29',12X,'
30',/)
DO 624 I=1,NI
WRITE(6,625)I,(FLUX0(I,J),J=25,30)
625 FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),/)
624 CONTINUE
STOP
END
```


DESCONTINUA MATRICIAL

```

SUBROUTINE UMD(A,C,S,F,SN,R,INT,XK,N)
DIMENSION A(N,N),C(N),F(N),S(N),SN(N),R(N),B(N)
MAX=180
XK=0.
ERRO=1.00DE-06
SOMA=C.
DO 69 I=1,N
F(I)=(1-I)*(N-I)
SOMA=SOMA+F(I)*F(I)
69 SOMA=SOMA+F(I)*F(I)
SNOR=SQRT(SOMA)
DO 70 I=1,N
F(I)=F(I)/SNOR
70 F(I)=F(I)/SNOR
WRITE(6,16)(I,F(I),I=1,N)
16 FORMAT(/,10X,'F(',12,')=',E12.5)
INVERSAO DA MATRIZ POR ELIM. DE GAUSS
B(1)=A(1,2)/A(1,1)
DO 25 I=2,M
M=N-1
R(I)=A(I,1)-A(1,I-1)*B(I-1)
B(I)=A(I,1+1)/R(I)
25 CONTINUE
R(N)=A(N,N)-A(N,N-1)*B(N-1)
INT=C.
XKN=0.
FONTE E KEFF
DO 1 J=1,N
S(J)=C(J)*F(J)
1 XKN=XKN+S(J)
WRITE(6,888)XKN,INT
888 FORMAT(3X,'KEFF=',E12.5,3X,'ITERACOES NUMERO',2X,13)
CONVERGENCIA E NUMERO LIMITE DE ITERACOES
IF(ABS(XKN-XK).LT.ERRO)GO TO 8
IF(INT.GT.MAX)GO TO 9
FONTE NORMALIZADA
DO 2 J=1,N
S(J)=S(J)/XKN
2 SOLUCAO DO PROBLEMA UM-D-UM-G
SN(1)=S(1)/A(1,1)
DO 29 I=2,N
SN(I)=(S(I)-A(I,I-1)*SN(I-1))/R(I)
29 CONTINUE
F(N)=SN(N)
M=N-1
DO 30 I=1,M
J=N-I
F(J)=SN(J)-B(J)*F(J+1)
INT=INT+1
XK=XKN
GO TO 5
8 WRITE(6,18)XK,INT
18 FORMAT(10X,'XK=',E12.5,10X,'INT=',13)
WRITE(6,19)(I,F(I),I=1,N)
19 FORMAT(10X,'F(',13,')=',E12.5)
GO TO 10

```

```

9 WRITE(6,20)INF
20 FORMAT(10X,'NAO CONVERGE',10X,I3)
10 RETURN
END
DIMENSION A(30,30),C(30),RLT(30),RLJ(30,30),RLS(3),PROD(15)
DIMENSION SCAM(30),SCA(15,30),D(15,30),SCF(15,30)
DIMENSION SN(30),S(30),B(30),F(30),R(30),X(2,15)
DIMENSION FLUXO(15,30)
READ(5,60)N,NA,NI,NII
60 FORMAT(4I2)
READ(5,67)(X(1,I),I=1,NI)
67 FORMAT(7E10.3)
READ(5,66)(X(2,I),I=1,NI)
66 FORMAT(7E10.3)
READ(5,68)D1,D2,D3,D4,SCA1,SCA2,SCF3,SCA4
68 FORMAT(9F5.3)
READ(5,61)SCF1,SCF2,SCF3,SCF4
61 FORMAT(4F6.4)
READ(5,62)XCIT
62 FORMAT(F9.7)
SQ1=0.
SQ2=0.
DO 77 I=1,NI
SQ1=SQ1+X(1,I)*X(1,I)
77 SQ2=SQ2+X(2,I)*X(2,I)
RSQ1=SQRT(SQ1)
RSQ2=SQRT(SQ2)
DO 78 I=1,NI
X(1,I)=X(1,I)/RSQ1
78 X(2,I)=X(2,I)/RSQ2
WRITE(6,205)(I,X(1,I),I,X(2,I),I=1,NI)
205 FORMAT(2X,'X1(',I2,')=' ,E12.5,2X,'X2(',I2,')=' ,E12.5)
WRITE(6,206)RSQ1,RSQ2
206 FORMAT(2X,'RSQ1=' ,E12.5,2X,'RSQ2=' ,E12.5)
READ(5,63)DELX,DELY
63 FORMAT(2F4.2)
READ(5,888)DIV
888 FORMAT(F3.1)
DELX=DELX/DIV
DELY=DELY/DIV
READ(5,890)ICASO
890 FORMAT(I1)
WRITE(6,700)
700 FORMAT(/,9X,'***** SINTESE DESCONTINUA *****
/,/)
WRITE(6,701)
701 FORMAT(/,9X,'PARAMETROS MATERIAIS',10X,'MALHAS LIMITRCFES',
/)
WRITE(6,702)
702 FORMAT(/,1X,'REGIAD',2X,'SCA',6X,'D',8X,'SCF',9X,'EIXO X',2
X,'EIXO
/,Y',/)
WRITE(6,703)SCA1,D1,SCF1,NII,NN
703 FORMAT(/,4X,'1',4X,F5.3,4X,F5.3,4X,F6.4,6X,' 1',2X,I2,2X,'

```

```

/2)
  NA=NII+1
  WRITE(6,704)SCA2,D2,SCF2,NA,NI,NN
704 FORMAT(/,4X,'2',4X,F5.3,4X,F5.3,4X,F6.4,6X,I2,2X,I2,2X,' 1'
,2X,I2)
  NAA=NN+1
  WRITE(6,705)SCA3,D3,SCF3,NII,NAA,N
705 FORMAT(/,4X,'3',4X,F5.3,4X,F5.3,4X,F6.4,6X,' 1',2X,I2,2X,I2
,2X,I2)
  WRITE(6,706)SCA4,D4,SCF4,NA,NI,NAA,N
706 FORMAT(/,4X,'4',4X,F5.3,4X,F5.3,4X,F6.4,6X,I2,2X,I2,2X,I2,2
X,I2,/)
  WRITE(6,707)
707 FORMAT(/,9X,'DIMENSÃO DA MALHA',/)
  WRITE(6,708)DELX
708 FORMAT(9X,'EM X',2X,F4.2,2X,'CM',/)
  WRITE(6,709)DELY
709 FORMAT(9X,'EM Y',2X,F4.2,2X,'CM',//)
  DELX2=2.*DELY/DELX
  DELY2=2.*DELX/DELY
  DXY=DELX*DELY
C****PREPARACAO DOS PARAMETROS MATERIAIS POR MALHA I,J****
  DO 50 J=1,NN
  DO 51 I=1,NII
    SCA(I,J)=SCA1
    SCF(I,J)=SCF1
    D(I,J)=D1
  51 CONTINUE
  DO 52 I=NII+1,NI
    SCA(I,J)=SCA2
    SCF(I,J)=SCF2
  52 D(I,J)=D2
  50 CONTINUE
  DO 53 J=NN+1,N
  DO 54 I=1,NII
    SCA(I,J)=SCA3
    SCF(I,J)=SCF3
  54 D(I,J)=D3
  DO 55 I=NII+1,NI
    SCA(I,J)=SCA4
    SCF(I,J)=SCF4
    D(I,J)=D4
  55 CONTINUE
  53 CONTINUE
C*****VARIÁVEIS DE CONTROLE DE RETORNO DO PROGRAMA*****
  IA=1
  KI=1
  KN=NN
  KT1=2
  KT2=NN
C*****CALCULO DAS FUNCOES PESO*****
  100 DO 27 I=1,NI
    27 PROD(I)=X(IA,I)*X(IA,I)
C*****CALCULO DA SECAO DE CHOQUE DE ABSORCAO E MATRIZ DE PRODUCA

```

```

DO 14 J=KI,KN
SCAM(J)=0.
C(J)=0.
DO 21 I=1,NI
SOMA1=PROD(I)*SCA(I,J)
SOMA2=PROD(I)*SCF(I,J)
SCAM(J)=SCAM(J)+SOMA1
C(J)=C(J)+SOMA2
21 CONTINUE
SCAM(J)=SCAM(J)*DXY
C(J)=C(J)*DXY
14 CONTINUE
C*****TESTE PARA CALCULO DE TERMOS DE EXTREMIDADE*****
IF(KI1.NE.2)GO TO 201
KR=2
KS=1
GO TO 200
201 KR=N-1
KS=N
C*****CALCULO DOS TERMOS DE FUGA MEDIOS NA DIRECAO Y*****
200 DO 15 J=KI1,KI2
RLJ(J-1,J)=0.
RLJ(J+1,J)=0.
DO 8 I=1,NI
SOMA1=(1./(1./D(I,J)+1./D(I,J-1)))*PROD(I)
SOMA2=(1./(1./D(I,J)+1./D(I,J+1)))*PROD(I)
RLJ(J-1,J)=RLJ(J-1,J)+SOMA1
RLJ(J+1,J)=RLJ(J+1,J)+SOMA2
8 CONTINUE
RLJ(J-1,J)=RLJ(J-1,J)*DELY2
RLJ(J+1,J)=RLJ(J+1,J)*DELY2
15 CONTINUE
RLJ(KR,KS)=0.
JDIF=KS-KR+2
RLS(JDIF)=0.
DO 2 I=1,NI
SOMA1=(1./(1./D(I,KS)+1./D(I,KR)))*PROD(I)
SOMA2=D(I,KS)*PROD(I)
RLJ(KR,KS)=RLJ(KR,KS)+SOMA1
2 RLS(JDIF)=RLS(JDIF)+SOMA2
RLJ(KR,KS)=RLJ(KR,KS)*DELY2
RLS(JDIF)=RLS(JDIF)*DELY2
C*****TERMOS DE FUGA MEDIOS NA DIRECAO X*****
DO 9 J=KI,KN
RLT(J)=0.
DO 10 I=2,NI-1
PROD1=PROD(I)-X(IA,I)*X(IA,I-1)
PROD2=PROD(I)-X(IA,I)*X(IA,I+1)
SOMA1=(1./(1./D(I,J)+1./D(I-1,J)))*PROD1
SOMA2=(1./(1./D(I,J)+1./D(I+1,J)))*PROD2
RLT(J)=RLT(J)+SOMA1+SOMA2
10 CONTINUE
PROD1=PROD(NI)-X(IA,NI)*X(IA,NI-1)
PROD2=PROD(1)-X(IA,1)*X(IA,2)

```

```

SOMA1=(1./(1./D(NI,J)+1./D(NI-1,J)))*PRD1
SOMA2=(1./(1./D(1,J)+1./D(2,J)))*PRD2
SOMA4=PRD(NI)*D(NI,J)
RLT(J)=RLT(J)+SOMA1+SOMA2+SOMA4
RLT(J)=RLT(J)*DELX2
9 CONTINUE
C*****CALCULO DO TERMO DE FUGA TOTAL PARA MALHA J****
DO 24 J=KI1,KI2
24 RLT(J)=RLT(J)+SCAM(J)+RLJ(J-1,J)+RLJ(J+1,J)
RLT(KS)=RLT(KS)+SCAM(KS)+RLJ(KR,KS)*RLS(JCIF)
C*****TESTE DE RETORNO DO PROGRAMA*****
IF(IA.EQ.2)GO TO 500
IA=2
KI=NN+1
KN=N
KI1=NN+1
KI2=N-1
GO TO 100
C*****MONTAGEM DA MATRIZ DE DESTRUICAO A*****
C*****ZERANDO A MATRIZ A EM TODAS AS POSICOES*****
500 DO 5 K=1,N
DO 5 J=1,N
A(K,J)=0.
5 CONTINUE
C*****GERANDO TERMOS NAO NULOS*****
A(1,1)=RLT(1)
A(1,2)=-RLJ(2,1)
A(N,N-1)=-RLJ(N-1,N)
A(N,N)=RLT(N)
DO 3 J=2,N-1
A(J,J-1)=-RLJ(J-1,J)
A(J,J)=RLT(J)
A(J,J+1)=-RLJ(J+1,J)
3 CONTINUE
CALL UMD(A,C,S,F,SN,B,R,INT,XK,N)
WRITE(6,110)
WRITE(6,111)
WRITE(6,112)XK,XCIT
WRITE(6,113)
ABSOL=ABS(XK-XCIT)
RELAT=ABSOL/XCIT
PERCT=RELAT*100
WRITE(6,114)ABSOL,RELAT,PERCT
110 FORMAT(/,20X,'COMPARACAO COM RESULTADO DIF. FINITAS KEFF',/
)
111 FORMAT(/,10X,'KEFF DA SINTESE',10X,'KEFF DE CIF. FINITAS',/
)
112 FORMAT(10X,1PE12.5,12X,1PE12.5)
113 FORMAT(/,10X,'ERRO ABSOLUTO',5X,'ERRO RELATIVO',5X,'ERRO PE
RCENTUA
/L')
114 FORMAT(/,10X,1PE12.5,6X,1PE12.5,5X,1PE12.5//)
DO 507 I=1,NI
DO 507 J=1,NN

```

```
507 FLUXO(I,J)=X(1,I)*F(J)
    DO 508 I=1,NI
    DO 508 J=NN+1,N
508 FLUXO(I,J)=X(2,I)*F(J)
    WRITE(6,602)
602 FORMAT(/,20X,'1',13X,'2',13X,'3',13X,'4',13X,'5',13X,'6',/)
    DO 603 I=1,NI
    WRITE(6,604)I,(FLUXO(I,J),J=1,6)
604 FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),/)
603 CONTINUE
    WRITE(6,605)
605 FORMAT(/,20X,'7',13X,'8',13X,'9',12X,'10',12X,'11',12X,'12',
,/)
    DO 606 I=1,NI
    WRITE(6,607)I,(FLUXO(I,J),J=7,12)
607 FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),/)
606 CONTINUE
    WRITE(6,608)
608 FORMAT(/,19X,'13',12X,'14',12X,'15',12X,'16',12X,'17',12X,'
18',/)
    DO 609 I=1,NI
    WRITE(6,610)I,(FLUXO(I,J),J=13,18)
610 FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),/)
609 CONTINUE
    WRITE(6,620)
620 FORMAT(/,19X,'19',12X,'20',12X,'21',12X,'22',12X,'23',12X,'
24',/)
    DO 621 I=1,NI
    WRITE(6,622)I,(FLUXO(I,J),J=19,24)
622 FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),/)
621 CONTINUE
    WRITE(6,623)
623 FORMAT(/,19X,'25',12X,'26',12X,'27',12X,'28',12X,'29',12X,'
30',/)
    DO 624 I=1,NI
    WRITE(6,625)I,(FLUXO(I,J),J=25,30)
625 FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),/)
624 CONTINUE
    STOP
    END
```

CONTINUA DIFERENCIAL

```

SUBROUTINE MULTC(DE1,DE2,J1,N1,J2,APL,N)
  DIMENSION DE1(N,N,2,2),DE2(N,2,2),APL(N,2,2)
  DO 1 II=1,2
    DO 1 IL=1,2
      APL(J1,II,IL)=0.
    DO 2 K=1,2
      SA=DE1(J1,N1,II,K)*DE2(J2,K,IL)
    2 APL(J1,II,IL)=APL(J1,II,IL)+SA
  1 CONTINUE
  RETURN
END
SUBROUTINE MULTD2(DE1,DE2,J1,N1,J2,APL,N)
  DIMENSION DE1(N,N,2,2),DE2(N,2,2),APL(N,2,2)
  DO 1 II=1,2
    DO 1 IL=1,2
      APL(J1,II,IL)=0.
    DO 2 K=1,2
      SA=DE2(J2,II,K)*DE1(J1,N1,K,IL)
    2 APL(J1,II,IL)=APL(J1,II,IL)+SA
  1 CONTINUE
  RETURN
END
SUBROUTINE MULT3(SE1,SE2,J1,J2,SS,N)
  DIMENSION SE1(N,2,2),SE2(N,2,2),SS(N,2,2)
  DO 1 II=1,2
    DO 1 IL=1,2
      SS(J1,II,IL)=0.
    DO 2 K=1,2
      SA=SE1(J1,II,K)*SE2(J2,K,IL)
    2 SS(J1,II,IL)=SS(J1,II,IL)+SA
  1 CONTINUE
  RETURN
END
SUBROUTINE MULT2(RE1,RE2,J1,J2,RS,N)
  DIMENSION RE1(N,2,2),RE2(N,2),RS(N,2)
  DO 1 IL=1,2
    RS(J1,IL)=0.
    DO 2 K=1,2
      2 RS(J1,IL)=RS(J1,IL)+RE1(J1,IL,K)*RE2(J2,K)
  1 CONTINUE
  RETURN
END
SUBROUTINE INVO(DE,DS,JJ,N)
  DIMENSION DE(N,2,2),DS(N,2,2)
  DEN=DE(JJ,1,1)*DE(JJ,2,2)-DE(JJ,1,2)*DE(JJ,2,1)
  DS(JJ,1,1)=DE(JJ,2,2)/DEN
  DS(JJ,2,2)=DE(JJ,1,1)/DEN
  DS(JJ,1,2)=-DE(JJ,1,2)/DEN
  DS(JJ,2,1)=-DE(JJ,2,1)/DEN
  RETURN
END
SUBROUTINE UMO(A,C,F,N,INT,XK,S,SN,B,R,A1,AP,DS,AS)
  DIMENSION A(N,N,2,2),C(N,2,2),F(N,2)
  DIMENSION S(N,2),SN(N,2),B(N,2,2),R(N,2,2)

```

```

DIMENSION A1(1,1,2,2),AP(N,2,2),DS(N,2,2),AS(N,2)
MAX=180
XK=0.
ERRQ=1.000E-06
SOM=0.
DO 69 I=1,N
F(I,1)=(I-1)*(N-I)
F(I,2)=F(I,1)
69 SOM=SOM+F(I,1)*F(I,1)
SNOR=SQRT(SOM)
DO 70 I=1,N
F(I,1)=F(I,1)/SNOR
70 F(I,2)=F(I,2)/SNOR
16 FORMAT(/,10X,'F(',I2,',1)=' ,1PE13.6,10X,'F(',I2,',2)=' ,1PE1

```

3.6)

C

```

INVERSAG DA MATRIZ POR ELIM.DE GAUSS
DEN=A(1,1,1,1)*A(1,1,2,2)-A(1,1,1,2)*A(1,1,2,1)
A1(1,1,2,2)=A(1,1,1,1)/DEN
A1(1,1,1,1)=A(1,1,2,2)/DEN
A1(1,1,1,2)=-A(1,1,1,2)/DEN
A1(1,1,2,1)=-A(1,1,2,1)/DEN
DO 99 II=1,2
DO 99 IL=1,2
B(1,II,IL)=0.
DO 98 K=1,2
SA=A1(1,1,II,K)*A(1,2,K,IL)
98 B(1,II,IL)=B(1,II,IL)+SA
99 CONTINUE
M=N-1
DO 25 I=2,M
IJ=I-1
CALL MULTD(A,B,I,IJ,IJ,AP,N)
DO 4 IA=1,2
DO 4 IB=1,2
4 R(I,IA,IB)=A(I,I,IA,IB)-AP(I,IA,IB)
CALL INVD(R,DS,I,N)
IJ=I+1
CALL MULTD2(A,DS,I,IJ,I,8,N)
25 CONTINUE
IN=N-1
CALL MULTD(A,B,N,IN,IN,AP,N)
DO 7 IA=1,2
DO 7 IB=1,2
7 R(N,IA,IB)=A(N,N,IA,IB)-AP(N,IA,IB)
INT=0.
5 XKN=0.
C
FONTE E KEFF
DO 1 J=1,N
S(J,1)=C(J,1,1)*F(J,1)+C(J,1,2)*F(J,2)
S(J,2)=C(J,2,1)*F(J,1)+C(J,2,2)*F(J,2)
1 XKN=XKN+S(J,1)+S(J,2)
WRITE(6,100)XKN,INT
100 FORMAT(10X,'XKN=' ,1PE13.6,10X,'ITERACAO NO.' ,1X,I3)
C
CONVERGENCIA E NUMERO LIMITE DE ITERACOES

```



```
67 FORMAT(7E10.3)
   READ(5,66)(X2(I),I=1,NI)
66 FORMAT(7E10.3)
   READ(5,68)D1,D2,D3,D4,SCA1,SCA2,SCA3,SCA4
68 FORMAT(8F5.3)
   READ(5,61)SCF1,SCF2,SCF3,SCF4
61 FORMAT(4F6.4)
   READ(5,62)XCIT
62 FORMAT(F9.7)
   SQ1=0.
   SQ2=0.
   DO 77 I=1,NI
   SQ1=SQ1+X1(I)*X1(I)
77 SQ2=SQ2+X2(I)*X2(I)
   RSQ1=SQRT(SQ1)
   RSQ2=SQRT(SQ2)
   DO 78 I=1,NI
   X1(I)=X1(I)/RSQ1
78 X2(I)=X2(I)/RSQ2
   WRITE(6,200)(I,X1(I),I,X2(I),I=1,15)
200 FORMAT(2X,'X1(',I2,')=' ,E12.5,2X,'X2(',I2,')=' ,E12.5)
201 FORMAT(2X,'RSQ1=' ,E12.5,2X,'RSQ2=' ,E12.5)
   READ(5,63)DELX,DELY
63 FORMAT(2F4.2)
   READ(5,888)DIV
888 FORMAT(F3.1)
   DELX=DELX/DIV
   DELY=DELY/DIV
   READ(5,890)ICASQ
890 FORMAT(I1)
   DELX2=DELX+DELX
   DELY2=2./DELY
   DO 1 J=1,N
   SCA110=0.
   SCA120=0.
   SCA210=0.
   SCA220=0.
   SCF110=0.
   SCF120=0.
   SCF210=0.
   SCF220=0.
   SCL110=0.
   SCL120=0.
   SCL210=0.
   SCL220=0.
   DAU110=0.
   DAU120=0.
   DAU210=0.
   DAU220=0.
   DO 2 I=1,NI
   IF(J.GT.NN)GO TO 40
30 IF(I.EQ.1)GO TO 31
   IF(I.EQ.NI)GO TO 32
   GRADX1(I)=(X1(I+1)-X1(I-1))/DELX2
```

```
      GRADX2(I)=(X2(I+1)-X2(I-1))/DELX2
      GO TO 33
31  GRADX1(I)=(X1(I+1)-X1(I))/DELX2
      GRADX2(I)=(X2(I+1)-X2(I))/DELX2
      GO TO 3
32  GRADX1(I)=(-X1(I)-X1(I-1))/DELX2
      GRADX2(I)=(-X2(I)-X2(I-1))/DELX2
      GO TO 4
33  IF(I.GT.NII)GO TO 4
      3  SCA=SCA1
         DJ=D1
         SCF=SCF1
         GO TO 12
      4  SCA=SCA2
         DJ=D2
         SCF=SCF2
         GO TO 12
40  IF(I.EQ.1)GO TO 41
      IF(I.EQ.NI)GO TO 42
      GRADX1(I)=(X1(I+1)-X1(I-1))/DELX2
      GRADX2(I)=(X2(I+1)-X2(I-1))/DELX2
      GO TO 43
41  GRADX1(I)=(X1(I+1)-X1(I))/DELX2
      GRADX2(I)=(X2(I+1)-X2(I))/DELX2
      GO TO 13
42  GRADX1(I)=(-X1(I)-X1(I-1))/DELX2
      GRADX2(I)=(-X2(I)-X2(I-1))/DELX2
      GO TO 8
43  IF(I.GT.NII)GO TO 8
13  SCA=SCA3
      DJ=D3
      SCF=SCF3
      GO TO 12
      8  SCA=SCA4
         SCF=SCF4
         DJ=D4
12  QUAX11=X1(I)*X1(I)
      QUAX12=X1(I)*X2(I)
      QUAX21=QUAX12
      QUAX22=X2(I)*X2(I)
      SCL11=DJ*GRADX1(I)*GRADX1(I)
      SCL12=DJ*GRADX1(I)*GRADX2(I)
      SCL21=SCL12
      SCL22=DJ*GRADX2(I)*GRADX2(I)
      SCA11=SCA*QUAX11
      SCA12=SCA*QUAX12
      SCA21=SCA12
      SCA22=SCA*QUAX22
      DAU11=DJ*QUAX11
      DAU12=DJ*QUAX12
      DAU21=DAU12
      DAU22=DJ*QUAX22
      SCF11=SCF*QUAX11
      SCF12=SCF*QUAX12
```

```

SCF21=SCF12
SCF22=SCF*QUAX22
SCA110=SCA110+SCA11
SCA120=SCA120+SCA12
SCA210=SCA210+SCA21
SCA220=SCA220+SCA22
SCL110=SCL110+SCL11
SCL120=SCL120+SCL12
SCL210=SCL210+SCL21
SCL220=SCL220+SCL22
SCF110=SCF110+SCF11
SCF120=SCF120+SCF12
SCF210=SCF210+SCF21
SCF220=SCF220+SCF22
DAU110=DAU110+DAU11
DAU120=DAU120+DAU12
DAU210=DAU210+DAU21
DAU220=DAU220+DAU22
2 CONTINUE
SCAM(J,1,1)=SCA110
SCAM(J,1,2)=SCA120
SCAM(J,2,1)=SCA210
SCAM(J,2,2)=SCA220
SCLM(J,1,1)=SCL110
SCLM(J,1,2)=SCL120
SCLM(J,2,1)=SCL210
SCLM(J,2,2)=SCL220
SCFM(J,1,1)=SCF110
SCFM(J,1,2)=SCF120
SCFM(J,2,1)=SCF210
SCFM(J,2,2)=SCF220
D(J,1,1)=DAU110
D(J,1,2)=DAU120
D(J,2,1)=DAU210
D(J,2,2)=DAU220
1 CONTINUE
100 FORMAT(3(1X,'SCAM(',I2,',',I1,',',I1,')=',E13.6))
102 FORMAT(3(1X,'SCFM(',I2,',',I1,',',I1,')=',E13.6))
104 FORMAT(3(1X,'SCLM(',I2,',',I1,',',I1,')=',E13.6))
106 FORMAT(3(1X,'D(',I2,',',I1,',',I1,')=',E13.6))
C      OPCAO PARA GERACAO DOS TERMOS DE FUGA DO ARQUIVO CONTINUA
      DO 11 J=2,NN-1
      DO 6 IA=1,2
      DO 6 IB=1,2
      RL(J,J,IA,IB)=D(J,IA,IB)/DELY
      RL(J+1,J,IA,IB)=D(J+1,IA,IB)/DELY
6 CONTINUE
11 CONTINUE
      DO 7 J=NN+2,N-1
      DO 7 IA=1,2
      DO 7 IB=1,2
      RL(J,J,IA,IB)=D(J,IA,IB)/DELY
7 RL(J+1,J,IA,IB)=D(J+1,IA,IB)/DELY
C      APLICACAO DE CONDICAO DE INTERFACE PARA TERMOS DE FUGA

```

```

C      PARA J=NN
      DO 9 IA=1,2
      DO 9 IB=1,2
      RL(NN,NN,IA,IB)=D(NN,IA,IB)/DELY
9      SOMA(1,IA,IB)=D(NN+1,IA,IB)+D(NN,IA,IB)
      CALL INVD(SOMA,DD,1,N)
      CALL MULT3(DD,D,1,NN+1,SOMA,N)
      CALL MULT3(D,SOMA,NN,1,DD,N)
      DO 25 IA=1,2
      DO 25 IB=1,2
25     RL(NN+1,NN,IA,IB)=DD(NN,IA,IB)*DELY2
C      PARA J=NN+1
      DO 26 IA=1,2
      DO 26 IB=1,2
      RL(NN+2,NN+1,IA,IB)=D(NN+2,IA,IB)/DELY
26     SOMA(2,IA,IB)=D(NN+1,IA,IB)+D(NN,IA,IB)
      CALL INVD(SOMA,DD,2,N)
      CALL MULT3(DD,D,2,NN,SOMA,N)
      CALL MULT3(D,SOMA,NN+1,2,DD,N)
      DO 28 IA=1,2
      DO 28 IB=1,2
28     RL(NN+1,NN+1,IA,IB)=DD(NN+1,IA,IB)*DELY2
      DO 23 IA=1,2
      DO 23 IB=1,2
23     RL(N,N,IA,IB)=D(N,IA,IB)/DELY
C      CONDICAÇÃO DE CONTO RNO PRIMEIRA E ÚLTIMA MALHAS
      DO 15 IA=1,2
      DO 15 IB=1,2
      RL1(IA,IB)=DELY2*D(1,IA,IB)
15     RL30(IA,IB)=DELY2*D(N,IA,IB)
C      ZERANDO TODAS AS POSIÇÕES DA MATRIZ A
      DO 16 J=1,N
      DO 16 NJ=1,N
      DO 16 IA=1,2
      DO 16 IB=1,2
16     A(J,NJ,IA,IB)=0.
C      CÁLCULO DE A(1,1), A(1,2), A(2,1), A(N,N)
      DO 17 IA=1,2
      DO 17 IB=1,2
      A(1,1,IA,IB)=RL(2,2,IA,IB)+RL1(IA,IB)+DELY*(SCAM(1,IA,IB)+S
CLM(1,I
      /A,IB))
      A(1,2,IA,IB)=-RL(2,2,IA,IB)
      A(2,1,IA,IB)=-RL(2,2,IA,IB)
17     A(N,N,IA,IB)=RL(N,N,IA,IB)+RL30(IA,IB)+DELY*(SCAM(N,IA,IB)+
SCLM(
      /N,IA,IB))
C      CÁLCULO DOS OUTROS ELEMENTOS DA MATRIZ A
      DO 19 J=2,N-1
      DO 19 IA=1,2
      DO 19 IB=1,2
      A(J,J,IA,IB)=RL(J,J,IA,IB)+RL(J+1,J,IA,IB)+DELY*(SCAM(J,IA,
IB)+SCL
      /M(J,IA,IB))

```

```

      A(J,J+1,IA,IB)=-RL(J+1,J,IA,IB)
19  A(J+1,J,IA,IB)=-RL(J+1,J,IA,IB)
      DO 22 J=1,N
      DO 22 IA=1,2
      DO 22 IB=1,2
22  C(J,IA,IB)=DELY*SCFM(J,IA,IB)
      CALL UMD(A,C,F,N,INT,XK,S,SN,B,R,A1,AP,DS,AS)
700 WRITE(6,701)
701 FORMAT(/,20X,'PARAMETROS MATERIAIS',10X,'MALHAS LIMITROFES'
/,)
      WRITE(6,702)
702 FORMAT(/,12X,'REGIAO',2X,'SCA',6X,'C',8X,'SCF',9X,'EIXO X',
2X,'EIX
      / O Y',/)
      WRITE(6,703)SCA1,D1,SCF1,NII,NN
703 FORMAT(/,15X,'1',4X,F5.3,4X,F5.3,4X,F6.4,6X,' 1',2X,I2,2X,'
1',2X,
      /I2)
      NAA=NII+1
      WRITE(6,704)SCA2,D2,SCF2,NA,NI,NN
704 FORMAT(/,15X,'2',4X,F5.3,4X,F5.3,4X,F6.4,6X,I2,2X,I2,2X,' 1
',2X,I2
      /)
      NAA=NN+1
      WRITE(6,705)SCA3,D3,SCF3,NII,NAA,N
705 FORMAT(/,15X,'3',4X,F5.3,4X,F5.3,4X,F6.4,6X,' 1',2X,I2,2X,I
2,2X,I2
      /)
      WRITE(6,706)SCA4,D4,SCF4,NA,NI,NAA,N
706 FORMAT(/,15X,'4',4X,F5.3,4X,F5.3,4X,F6.4,6X,I2,2X,I2,2X,I2,
2X,I2,
      /)
      WRITE(6,707)
707 FORMAT(/,20X,'DIMENSAO DA MALHA',/)
      WRITE(6,708)DELX
708 FORMAT(20X,'EM X',2X,F4.2,2X,'CM',/)
      WRITE(6,709)DELY
709 FORMAT(20X,'EM Y',2X,F4.2,2X,'CM',/)
      WRITE(6,110)
      WRITE(6,111)
      WRITE(6,112)XK,XCIT
      WRITE(6,113)
      ABSOL=ABS(XK-XCIT)
      RELAT=ABSOL/XCIT
      PERCT=RELAT*100
      WRITE(6,114)ABSOL,RELAT,PERCT
110 FORMAT(/,20X,'COMPARACAO COM RESULTADO DIF. FINITAS KEFF',/
)
111 FORMAT(/,10X,'KEFF DA SINTESE',10X,'KEFF DE DIF. FINITAS',/
)
112 FORMAT(10X,1PE12.5,12X,1PE12.5)
113 FORMAT(/,10X,'ERRO ABSOLUTO',5X,'ERRO RELATIVO',5X,'ERRO
/PERCENTUAL')
114 FORMAT(/,10X,1PE12.5,6X,1PE12.5,5X,1PE12.5//)

```

```
      DO 500 I=1,NI
      DO 500 J=1,N
500  FLUXO(I,J)=X1(I)*F(J,1)+X2(I)*F(J,2)
C*****IMPRESSAO DOS FLUXOS *****
      WRITE(6,602)
602  FORMAT(/,20X,'1',13X,'2',13X,'3',13X,'4',13X,'5',13X,'6',/)
      DO 603 I=1,NI
      WRITE(6,604)I,(FLUXO(I,J),J=1,6)
604  FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),/)
603  CONTINUE
      WRITE(6,605)
605  FORMAT(/,20X,'7',13X,'8',13X,'9',12X,'10',12X,'11',12X,'12',
/,/)
      DO 606 I=1,NI
      WRITE(6,607)I,(FLUXO(I,J),J=7,12)
607  FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),/)
606  CONTINUE
      WRITE(6,608)
608  FORMAT(/,19X,'13',12X,'14',12X,'15',12X,'16',12X,'17',12X,'
18',/)
      DO 609 I=1,NI
      WRITE(6,610)I,(FLUXO(I,J),J=13,18)
610  FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),/)
609  CONTINUE
      WRITE(6,620)
620  FORMAT(/,19X,'19',12X,'20',12X,'21',12X,'22',12X,'23',12X,'
24',/)
      DO 621 I=1,NI
      WRITE(6,622)I,(FLUXO(I,J),J=19,24)
622  FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),/)
621  CONTINUE
      WRITE(6,623)
623  FORMAT(/,19X,'25',12X,'26',12X,'27',12X,'28',12X,'29',12X,'
30',/)
      DO 624 I=1,NI
      WRITE(6,625)I,(FLUXO(I,J),J=25,30)
625  FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),/)
624  CONTINUE
      STOP
      END
```

CONTINUA MATRICIAL

```

SUBROUTINE MULT0(DE1,DE2,J1,N1,J2,APL,N)
DIMENSION DE1(N,N,2,2),DE2(N,2,2),APL(N,2,2)
DO 1 II=1,2
DO 1 IL=1,2
APL(J1,II,IL)=0.
DO 2 K=1,2
SA=DE1(J1,N1,II,K)*DE2(J2,K,IL)
2 APL(J1,II,IL)=APL(J1,II,IL)+SA
1 CONTINUE
RETURN
END
SUBROUTINE MULTC2(DE1,DE2,J1,N1,J2,APL,N)
DIMENSION DE1(N,N,2,2),DE2(N,2,2),APL(N,2,2)
DO 1 II=1,2
DO 1 IL=1,2
APL(J1,II,IL)=0.
DO 2 K=1,2
SA=DE2(J2,II,K)*DE1(J1,N1,K,IL)
2 APL(J1,II,IL)=APL(J1,II,IL)+SA
1 CONTINUE
RETURN
END
SUBROUTINE MULT3(SE1,SE2,J1,J2,SS,N)
DIMENSION SE1(N,2,2),SE2(N,2,2),SS(N,2,2)
DO 1 II=1,2
DO 1 IL=1,2
SS(J1,II,IL)=0.
DO 2 K=1,2
SA=SE1(J1,II,K)*SE2(J2,K,IL)
2 SS(J1,II,IL)=SS(J1,II,IL)+SA
1 CONTINUE
RETURN
END
SUBROUTINE MULT2(RE1,RE2,J1,J2,RS,N)
DIMENSION RE1(N,2,2),RE2(N,2),RS(N,2)
DO 1 IL=1,2
RS(J1,IL)=0.
DO 2 K=1,2
2 RS(J1,IL)=RS(J1,IL)+RE1(J1,IL,K)*RE2(J2,K)
1 CONTINUE
RETURN
END
SUBROUTINE INVD(DE,DS,JJ,N)
DIMENSION DE(N,2,2),DS(N,2,2)
DEN=DE(JJ,1,1)*DE(JJ,2,2)-DE(JJ,1,2)*DE(JJ,2,1)
DS(JJ,1,1)=DE(JJ,2,2)/DEN
DS(JJ,2,2)=DE(JJ,1,1)/DEN
DS(JJ,1,2)=-DE(JJ,1,2)/DEN
DS(JJ,2,1)=-DE(JJ,2,1)/DEN
RETURN
END
SUBROUTINE UMD(A,C,F,N,INT,XK,S,SN,B,R,A1,AP,DS,AS)
DIMENSION A(N,N,2,2),C(N,2,2),F(N,2)
DIMENSION S(N,2),SN(N,2),B(N,2,2),R(N,2,2)

```



```

DIMENSION A1(1,1,2,2),AP(N,2,2),DS(N,2,2),AS(N,2)
MAX=180
XK=0.
ERRO=1.000E-06
SUM=0.
DO 69 I=1,N
  F(I,1)=(I-1)*(N-I)
  F(I,2)=F(I,1)
69 SUM=SUM+F(I,1)*F(I,1)
  SNOR=SQRT(SUM)
DO 70 I=1,N
  F(I,1)=F(I,1)/SNOR
70 F(I,2)=F(I,2)/SNOR
16 FORMAT(/,10X,'F(',I2,',',I1)=',1PE13.6,10X,'F(',I2,',',I2)=',1PE1
3.6)
C INVERSAC DA MATRIZ POR ELIM.DE GAUSS
DEN=A(1,1,1,1)*A(1,1,2,2)-A(1,1,1,2)*A(1,1,2,1)
A1(1,1,2,2)=A(1,1,1,1)/DEN
A1(1,1,1,1)=A(1,1,1,2)/DEN
A1(1,1,1,2)=-A(1,1,1,2)/DEN
A1(1,1,2,1)=-A(1,1,2,1)/DEN
DO 99 II=1,2
DO 99 IL=1,2
  B(1,II,IL)=0.
DO 98 K=1,2
  SA=A1(1,1,II,K)*A(1,2,K,IL)
98 B(1,II,IL)=B(1,II,IL)+SA
99 CONTINUE
M=N-1
DO 25 I=2,M
  IJ=I-1
  CALL MULTD(A,B,I,IJ,IJ,AP,N)
DO 4 IA=1,2
DO 4 IB=1,2
  4 R(I,IA,IB)=A(I,I,IA,IB)-AP(I,IA,IB)
  CALL INVDC(R,DS,I,N)
  IJ=I+1
  CALL MULTD2(A,DS,I,IJ,I,B,N)
25 CONTINUE
IN=N-1
CALL MULTD(A,B,N,IN,IN,AP,N)
DO 7 IA=1,2
DO 7 IB=1,2
  7 R(N,IA,IB)=A(N,N,IA,IB)-AP(N,IA,IB)
  INT=0.
  5 XKN=0.
C FONTE E KEFF
DO 1 J=1,N
  S(J,1)=C(J,1,1)*F(J,1)+C(J,1,2)*F(J,2)
  S(J,2)=C(J,2,1)*F(J,1)+C(J,2,2)*F(J,2)
  1 XKN=XKN+S(J,1)+S(J,2)
  WRITE(6,100)XKN,INT
100 FORMAT(10X,'XKN=',1PE13.6,10X,'ITERACAO NO.',1X,I3)
C CONVERGENCIA E NUMERO LIMITE DE ITERACOES

```



```
67 FORMAT(7E10.3)
   READ(5,66)(X(2,I),I=1,NI)
66 FORMAT(7E10.3)
   READ(5,68)D1,D2,D3,D4,SCA1,SCA2,SCA3,SCA4
68 FORMAT(8F5.3)
   READ(5,61)SCF1,SCF2,SCF3,SCF4
61 FORMAT(4F6.4)
   READ(5,62)XC1I
62 FORMAT(F9.7)
   SQ1=0.
   SQ2=0.
   DO 77 I=1,NI
     SQ1=SQ1+X(1,I)*X(1,I)
77 SQ2=SQ2+X(2,I)*X(2,I)
   RSQ1=SQRT(SQ1)
   RSQ2=SQRT(SQ2)
   DO 78 I=1,NI
     X(1,I)=X(1,I)/RSQ1
78 X(2,I)=X(2,I)/RSQ2
   WRITE(6,200)(I,X(1,I),I,X(2,I),I=1,15)
200 FORMAT(2X,'X1(',I2,')=',E12.5,2X,'X2(',I2,')=',E12.5)
201 FORMAT(2X,'RSQ1=',E12.5,2X,'RSQ2=',E12.5)
   READ(5,63)DELX,DELY
63 FORMAT(2F4.2)
   READ(5,888)DIV
888 FORMAT(F3.1)
   DELX=DELX/DIV
   DELY=DELY/DIV
   READ(5,890)ICASO
890 FORMAT(I1)
   DELX2=2.*DELY/DELX
   DELY2=2.*DELX/DELY
   DXY=DELX*DELY
C****PREPARACAO DOS PARAMETROS MATERIAIS POR MALHA I,J***
   DO 50 J=1,NN
     DO 51 I=1,NII
       SCA(I,J)=SCA1
       SCF(I,J)=SCF1
       D(I,J)=D1
51 CONTINUE
     DO 52 I=NII+1,NI
       SCA(I,J)=SCA2
       SCF(I,J)=SCF2
52 D(I,J)=D2
50 CONTINUE
     DO 53 J=NN+1,N
       DO 54 I=1,NII
         SCA(I,J)=SCA3
         SCF(I,J)=SCF3
54 D(I,J)=D3
       DO 55 I=NII+1,NI
         SCA(I,J)=SCA4
         SCF(I,J)=SCF4
         D(I,J)=D4
```

```
55 CONTINUE
53 CONTINUE
  DO 27 I=1,NI
    DO 27 IA=1,2
      DO 27 IB=1,2
        27 PROD(IA,IB,I)=X(IA,I)*X(IB,I)
C***CALCULO DE SECAO DE CHOQUE DE ABSORCAO MEDIA NA MALHA J***
C***CALCULO DA MATRIZ DE PRODUCAO C***
  DO 14 J=1,N
    DO 14 IA=1,2
      DO 14 IB=1,2
        SCAM(J,IA,IB)=0.
        C(J,IA,IB)=0.
        DO 21 I=1,NI
          SOMA1=PROD(IA,IB,I)*SCA(I,J)
          SOMA2=PROD(IA,IB,I)*SCF(I,J)
          SCAM(J,IA,IB)=SCAM(J,IA,IB)+SOMA1
21 C(J,IA,IB)=C(J,IA,IB)+SOMA2
          SCAM(J,IA,IB)=SCAM(J,IA,IB)+DXY
          C(J,IA,IB)=C(J,IA,IB)+DXY
14 CONTINUE
C*****TERMOS DE FUGA MEIOS NA DIRECAO Y*****
  DO 7 IA=1,2
    DO 7 IB=1,2
      DO 15 J=2,N-1
        RLJ(J-1,J,IA,IB)=J.
        RLJ(J+1,J,IA,IB)=0.
        DO 8 I=1,NI
          SOMA1=(1./(1./D(I,J)+1./D(I,J-1)))*PROD(IA,IB,I)
          SOMA2=(1./(1./D(I,J)+1./D(I,J+1)))*PROD(IA,IB,I)
          RLJ(J-1,J,IA,IB)=RLJ(J-1,J,IA,IB)+SOMA1
          RLJ(J+1,J,IA,IB)=RLJ(J+1,J,IA,IB)+SOMA2
8 CONTINUE
        RLJ(J-1,J,IA,IB)=RLJ(J-1,J,IA,IB)*DELY2
        RLJ(J+1,J,IA,IB)=RLJ(J+1,J,IA,IB)*DELY2
15 CONTINUE
        RLJ(2,1,IA,IB)=0.
        RLJ(N-1,N,IA,IB)=0.
        RLJ1(IA,IB)=0.
        RLJN(IA,IB)=0.
        DO 2 I=1,NI
          SOMA1=(1./(1./D(I,N)+1./D(I,N-1)))*PROD(IA,IB,I)
          SOMA2=(1./(1./D(I,1)+1./D(I,2)))*PROD(IA,IB,I)
          SOMA3=D(I,1)*PROD(IA,IB,I)
          SOMA4=D(I,N)*PROD(IA,IB,I)
          RLJ(2,1,IA,IB)=RLJ(2,1,IA,IB)+SOMA2
          RLJ(N-1,N,IA,IB)=RLJ(N-1,N,IA,IB)+SOMA1
          RLJ1(IA,IB)=RLJ1(IA,IB)+SOMA3
2 RLJN(IA,IB)=RLJN(IA,IB)+SOMA4
          RLJ(2,1,IA,IB)=RLJ(2,1,IA,IB)*DELY2
          RLJ(N-1,N,IA,IB)=RLJ(N-1,N,IA,IB)*DELY2
          RLJ1(IA,IB)=RLJ1(IA,IB)*DELY2
          RLJN(IA,IB)=RLJN(IA,IB)*DELY2
7 CONTINUE
```

C*****TERMOS DE FUGA MEDIOS NA DISRECAO X*****

```

DO 9 J=1,N
DO 9 IA=1,2
DO 9 IB=1,2
RLT(J,IA,IB)=0.
DO 10 I=2,NI-1
PROD1=X(IA,I)*(X(IB,I)-X(IB,I-1))
PROD2=X(IA,I)*(X(IB,I)-X(IB,I+1))
SOMA1=(1./(1./D(I,J)+1./D(I-1,J)))*PROD1
SOMA2=(1./(1./D(I,J)+1./D(I+1,J)))*PROD2
10 RLT(J,IA,IB)=RLT(J,IA,IB)+SOMA1+SOMA2
PROD1=X(IA,NI)*(X(IB,NI)-X(IB,NI-1))
PROD2=X(IA,1)*(X(IB,1)-X(IB,2))
SOMA1=(1./(1./D(NI,J)+1./D(NI-1,J)))*PROD1
SOMA2=(1./(1./D(1,J)+1./D(2,J)))*PROD2
SOMA3=PROD1*(X(IA,NI)-X(IA,1))
RLT(J,IA,IB)=RLT(J,IA,IB)+SOMA1+SOMA2+SOMA3
9 RLT(J,IA,IB)=RLT(J,IA,IB)*DELX2

```

C*****CALCULO DO TERMO DE FUGA NA MALHA J SOMADO NAS DIRECOES X Y

```

DO 23 IA=1,2
DO 23 IB=1,2
DO 24 J=2,N-1
RLT(J,IA,IB)=RLT(J,IA,IB)+SCAN(J,IA,IB)+RLJ(J-1,J,IA,IB)+RL
J(J+1,J
/,IA,IB)
24 CONTINUE
RLT(1,IA,IB)=RLT(1,IA,IB)+SCAN(1,IA,IB)+RLJ1(IA,IB)+RLJ(2,1
,IA,IB)
RLT(N,IA,IB)=RLT(N,IA,IB)+SCAN(N,IA,IB)+RLJN(IA,IB)+RLJ(N-1
,N,IA,I
/8)
23 CONTINUE

```

C*****MONTAGEM DA MATRIZ DE DESTRUICAO*****

C*****ZERANDO A MATRIZ*****

```

DO 5 K=1,N
DO 5 J=1,N
DO 5 IA=1,2
DO 5 IB=1,2
5 A(K,J,IA,IB)=0.

```

C*****GERACAO DOS TERMOS NAO NULOS*****

```

DO 6 IA=1,2
DO 6 IB=1,2
A(1,1,IA,IB)=RLT(1,IA,IB)
A(1,2,IA,IB)=-RLJ(2,1,IA,IB)
A(N,N-1,IA,IB)=-RLJ(N-1,N,IA,IB)
A(N,N,IA,IB)=RLT(N,IA,IB)
DO 3 J=2,N-1
A(J,J-1,IA,IB)=-RLJ(J-1,J,IA,IB)
A(J,J,IA,IB)=RLT(J,IA,IB)
3 A(J,J+1,IA,IB)=-RLJ(J+1,J,IA,IB)
6 CONTINUE
CALL UMD(A,C,F,N,INT,XK,S,SN,E,R,A1,AP,DS,AS)
700 WRITE(6,701)

```

```

701 FORMAT(/,20X,'PARAMETROS MATERIAIS',10X,'MALHAS LIMITROFES'
,/)
WRITE(6,702)
702 FORMAT(/,12X,'REGIAO',2X,'SCA',6X,'C',8X,'SCF',9X,'EIXO X',
2X,'EIX
/ O Y',/)
WRITE(6,703)SCA1,D1,SCF1,NII,NN
703 FORMAT(/,15X,'1',4X,F5.3,4X,F5.3,4X,F6.4,6X,' 1',2X,I2,2X,'
1',2X,
/I2)
NA=NII+1
WRITE(6,704)SCA2,D2,SCF2,NA,NI,NN
704 FORMAT(/,15X,'2',4X,F5.3,4X,F5.3,4X,F6.4,6X,I2,2X,I2,2X,' 1
,2X,I2
/)
NAA=NA+1
WRITE(6,705)SCA3,D3,SCF3,NII,NAA,N
705 FORMAT(/,15X,'3',4X,F5.3,4X,F5.3,4X,F6.4,6X,' 1',2X,I2,2X,I
2,2X,I2
/)
WRITE(6,706)SCA4,D4,SCF4,NA,NI,NAA,N
706 FORMAT(/,15X,'4',4X,F5.3,4X,F5.3,4X,F6.4,6X,I2,2X,I2,2X,I2,
2X,I2,
/)
WRITE(6,707)
707 FORMAT(/,20X,'DIMENSAO DA MALHA',/)
WRITE(6,708)DELX
708 FORMAT(20X,'EM X',2X,F4.2,2X,'CM',/)
WRITE(6,709)DELY
709 FORMAT(20X,'EM Y',2X,F4.2,2X,'CM',/)
WRITE(6,110)
WRITE(6,111)
WRITE(6,112)XK,XCIT
WRITE(6,113)
ABSOL=ABS(XK-XCIT)
RELAT=ABSOL/XCIT
PERCT=RELAT*100
WRITE(6,114)ABSOL,RELAT,PERCT
110 FORMAT(/,20X,'COMPARACAO COM RESULTADO DIF. FINITAS KEFF',/
)
111 FORMAT(/,10X,'KEFF DA SINTESE',10X,'KEFF DE DIF. FINITAS',/
)
112 FORMAT(10X,1PE12.5,12X,1PE12.5)
113 FORMAT(/,10X,'ERRO ABSOLUTO',5X,'ERRO RELATIVO',5X,'ERRO
/PERCENTUAL')
114 FORMAT(/,10X,1PE12.5,6X,1PE12.5,5X,1PE12.5//)
DO 500 I=1,NI
DO 500 J=1,N
500 FLUXO(I,J)=X(1,I)*F(J,1)+X(2,I)*F(J,2)
C*****IMPRESSAO DOS FLUXOS*****
WRITE(6,602)
602 FORMAT(/,20X,'1',13X,'2',13X,'3',13X,'4',13X,'5',13X,'6',/)
DO 603 I=1,NI
WRITE(6,604)I,(FLUXO(I,J),J=1,6)

```

```
604 FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),/)
605 CONTINUE
    WRITE(6,605)
606 FORMAT(/,20X,'7',13X,'8',13X,'9',12X,'10',12X,'11',12X,'12',
/,)
    DO 606 I=1,NI
        WRITE(6,607)I,(FLUX0(I,J),J=7,12)
607 FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),/)
608 CONTINUE
    WRITE(6,608)
609 FORMAT(/,19X,'13',12X,'14',12X,'15',12X,'16',12X,'17',12X,'
18',/)
    DO 609 I=1,NI
        WRITE(6,610)I,(FLUX0(I,J),J=13,18)
610 FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),/)
611 CONTINUE
    WRITE(6,620)
612 FORMAT(/,19X,'19',12X,'20',12X,'21',12X,'22',12X,'23',12X,'
24',/)
    DO 621 I=1,NI
        WRITE(6,622)I,(FLUX0(I,J),J=19,24)
622 FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),/)
623 CONTINUE
    WRITE(6,623)
624 FORMAT(/,19X,'25',12X,'26',12X,'27',12X,'28',12X,'29',12X,'
30',/)
    DO 624 I=1,NI
        WRITE(6,625)I,(FLUX0(I,J),J=25,30)
625 FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),/)
626 CONTINUE
    STOP
    END
```

PSEUDO-CONTINUA

```
SUBROUTINE UMOC(A,C,S,F,SN,B,R,INT,XK,N)
DIMENSION A(30,30),C(30),F(30),S(30),SN(30),R(30),B(30)
MAX=180
XK=0.
ERRO=1.000E-06
SOMA=0.
DO 69 I=1,N
F(I)=(I-1)*(N-I)
69 SOMA=SOMA+F(I)*F(I)
SNOR=SQRT(SOMA)
DO 70 I=1,N
70 F(I)=F(I)/SNOR
WRITE(6,16)(I,F(I),I=1,N)
16 FORMAT(/,10X,'F(',I2,')=',E12.5)
C INVERSAC DA MATRIZ POR ELIM.DE GAUSS
B(1)=A(1,2)/A(1,1)
M=N-1
DO 25 I=2,M
R(I)=A(I,I)-A(I,I-1)*B(I-1)
B(I)=A(I,I+1)/R(I)
25 CONTINUE
R(N)=A(N,N)-A(N,N-1)*B(N-1)
INT=0.
5 XKN=0.
C FONTE E KEFF
DO 1 J=1,N
S(J)=C(J)*F(J)
1 XKN=XKN+S(J)
WRITE(6,888)XKN,INT
888 FORMAT(3X,'KEFF=',1PE12.5,3X,'ITERACAO NUMERO',2X,I3)
C CONVERGENCIA E NUMERO LIMITE DE ITERACOES
IF(ABS(XKN-XK).LT.ERRO)GO TO 8
IF(INT.GT.MAX)GO TO 9
C FONTE NORMALIZADA
DO 2 J=1,N
2 S(J)=S(J)/XKN
C SOLUCAO DO PROBLEMA UM-D,UM-G
SN(1)=S(1)/A(1,1)
DO 29 I=2,N
SN(I)=(S(I)-A(I,I-1)*SN(I-1))/R(I)
29 CONTINUE
F(N)=SN(N)
M=N-1
DO 30 I=1,M
J=N-I
30 F(J)=SN(J)-B(J)*F(J+1)
INT=INT+1
XK=XKN
GO TO 5
8 WRITE(6,18)XK,INT
18 FORMAT(10X,'XK=',E12.5,10X,'INT=',I3)
WRITE(6,19)(I,F(I),I=1,N)
19 FORMAT(10X,'F(',I3,')=',E12.5)
GO TO 10
```



```

9 WRITE(6,20)INT
20 FORMAT(10X,'NAO CONVERGE',10X,I3)
10 RETURN
END
SUBROUTINE HIST(NEX,NAI,NAF,NM,N,ALFA)
DIMENSION ALFA(2,N)
C*****CALCULO DAS FUNCOES ALFA *****
C*****CODOMINIO 1 *****
DO 4 J=1,NAI
ALFA(1,J)=1.
ALFA(2,J)=0.
4 CONTINUE
C*****CODOMINIO 2 *****
NEX1=NEX+1
COEF=1./(N**NEX+2.*NEX1)
K=NAI+NM
NK=NAF-K
DO 1 J=NAI+1,K
ALFA(2,J)=COEF*((J-NAI)**NEX1-(J-NAI-1)**NEX1)
ALFA(1,J)=1.-ALFA(2,J)
1 CONTINUE
COEF=1./(NK**NEX+2.*NEX1)
DO 2 J=K+1,NAF
ALFA(1,J)=COEF*((NAF-J+1)**NEX1-(NAF-J)**NEX1)
ALFA(2,J)=1.-ALFA(1,J)
2 CONTINUE
DO 5 J=NAF+1,N
ALFA(1,J)=0.
ALFA(2,J)=1.
5 CONTINUE
WRITE(6,3)(J,ALFA(1,J),J,ALFA(2,J),J=1,N)
3 FORMAT(3X,'ALFA(1,',I2,',)=',1PE13.5,2X,'ALFA(2,',I2,',)=',1P
E13.5)
RETURN
END
DIMENSION X(2,15),SCAM(30),C(30),ALFA(2,30)
DIMENSION SCA(15,30),SCF(15,30),D(15,30)
DIMENSION PROD(2,2,15,15),PRALF(2,2,30,30),FLUXG(15,30)
DIMENSION RLJ(30,30),RLT(30),A(30,30)
DIMENSION F(30),S(30),SN(30),R(30),B(30)
READ(5,60)N,NN,NI,NII
60 FORMAT(4I2)
READ(5,67)(X(1,I),I=1,NI)
67 FORMAT(7E10.3)
READ(5,66)(X(2,I),I=1,NI)
66 FORMAT(7E10.3)
READ(5,68)D1,D2,D3,D4,SCA1,SCA2,SCA3,SCA4
68 FORMAT(8F5.3)
READ(5,61)SCF1,SCF2,SCF3,SCF4
61 FORMAT(4F6.4)
READ(5,62)XCIT
62 FORMAT(F9.7)
SQ1=0.
SQ2=0.

```

```

DO 77 I=1,NI
SQ1=SQ1+X(1,I)*X(1,I)
77 SQ2=SQ2+X(2,I)*X(2,I)
RSQ1=SQRT(SQ1)
RSQ2=SQRT(SQ2)
DO 78 I=1,NI
X(1,I)=X(1,I)/RSQ1
78 X(2,I)=X(2,I)/RSQ2
WRITE(6,200)(I,X(1,I),I,X(2,I),I=1,15)
200 FORMAT(2X,'X1(',I2,')=' ,E12.5,2X,'X2(',I2,')=' ,E12.5)
201 FORMAT(2X,'RSQ1=' ,E12.5,2X,'RSQ2=' ,E12.5)
READ(5,63)DELX,DELY
63 FORMAT(2F4.2)
READ(5,888)DIV
888 FORMAT(F3.1)
DELX=DELX/DIV
DELY=DELY/DIV
READ(5,890)ICASO
890 FORMAT(I1)
READ(5,69)NEX,NAI,NAF,NM
69 FORMAT(4I3)
DELX2=2.*DELY/DELX
DELY2=2.*DELX/DELY
DXY=DELX*DELY
C****PREPARACAO DOS PARAMETROS MATERIAIS POR MALHA I,J***
DO 50 J=1,NN
DO 51 I=1,NII
SCA(I,J)=SCA1
SCF(I,J)=SCF1
D(I,J)=D1
51 CONTINUE
DO 52 I=NII+1,NI
SCA(I,J)=SCA2
SCF(I,J)=SCF2
52 D(I,J)=D2
50 CONTINUE
DO 53 J=NN+1,N
DO 54 I=1,NII
SCA(I,J)=SCA3
SCF(I,J)=SCF3
54 D(I,J)=D3
DO 55 I=NII+1,NI
SCA(I,J)=SCA4
SCF(I,J)=SCF4
D(I,J)=D4
55 CONTINUE
53 CONTINUE
CALL MIST(NEX,NAI,NAF,NM,N,ALFA)
C*****CALCULO DAS FUNCOES PESO*****
DO 27 IA=1,2
DO 27 IB=1,2
DO 28 I=2,NI-1
PROD(IA,IB,I-1,I)=X(IA,I-1)*X(IB,I)
PROD(IA,IB,I+1,I)=X(IA,I+1)*X(IB,I)

```

```

      PROD(IA,IB,I,I)=X(IA,I)*X(IB,I)
28  CONTINUE
      PROD(IA,IB,1,1)=X(IA,1)*X(IB,1)
      PROD(IA,IB,NI,NI)=X(IA,NI)*X(IB,NI)
      PROD(IA,IB,NI-1,NI)=X(IA,NI-1)*X(IB,NI)
      PROD(IA,IB,2,1)=X(IA,2)*X(IB,1)
      DO 29 J=2,N-1
        PRALF(IA,IB,J-1,J)=ALFA(IA,J-1)*ALFA(IB,J)
        PRALF(IA,IB,J+1,J)=ALFA(IA,J+1)*ALFA(IB,J)
        PRALF(IA,IB,J,J)=ALFA(IA,J)*ALFA(IB,J)
29  CONTINUE
      PRALF(IA,IB,1,1)=ALFA(IA,1)*ALFA(IB,1)
      PRALF(IA,IB,N,N)=ALFA(IA,N)*ALFA(IB,N)
      PRALF(IA,IB,N-1,N)=ALFA(IA,N-1)*ALFA(IB,N)
      PRALF(IA,IB,2,1)=ALFA(IA,2)*ALFA(IB,1)
27  CONTINUE
C*****CALCULO DE SECAO DE CHOQUE DE ABSORCAO MEDIA E MATRIZ DE P
RODUCAO
C*****CODOMINIO 1 *****
      DO 14 J=1,NAI
        SCAM(J)=0.
        C(J)=0.
        DO 21 I=1,NI
          SOMA1=PROD(1,1,I,I)*SCA(I,J)
          SOMA2=PROD(1,1,I,I)*SCF(I,J)
          SCAM(J)=SCAM(J)+SOMA1
          C(J)=C(J)+SOMA2
21  CONTINUE
        SCAM(J)=SCAM(J)*DXY
14  C(J)=C(J)*DXY
C*****CODOMINIO 2*****
      DO 70 J=NAI+1,NAF
        SCAM(J)=0.
        C(J)=0.
        DO 73 I=1,NI
          PXA=0.
          DO 71 IA=1,2
            DO 71 IB=1,2
              SOMA1=PROD(IA,IB,I,I)*PRALF(IA,IB,J,J)
71  PXA=PXA+SOMA1
              SOMA2=PXA*SCA(I,J)
              SOMA3=PXA*SCF(I,J)
              SCAM(J)=SCAM(J)+SOMA2
73  C(J)=C(J)+SOMA3
              SCAM(J)=SCAM(J)*DXY
70  C(J)=C(J)*DXY
C*****CODOMINIO 3 *****
      DO 13 J=NAF+1,N
        SCAM(J)=0.
        C(J)=0.
        DO 22 I=1,NI
          SOMA1=PROD(2,2,I,I)*SCA(I,J)
          SOMA2=PROD(2,2,I,I)*SCF(I,J)
          SCAM(J)=SCAM(J)+SOMA1

```

```
      C(J)=C(J)+SOMA2
22  CONTINUE
      SCAM(J)=SCAM(J)*DXY
      C(J)=C(J)*DXY
13  CONTINUE
C*****TERMS DE FUGA MEDIOS NA DIRECAO Y *****
C*****CODOMINIO 1 *****
      DO 80 J=2,NAI
      RLJ(J-1,J)=0.
      RLJ(J+1,J)=0.
      DO 8 I=1,NI
      SOMA1=(1./(1./D(I,J)+1./D(I,J-1)))*PROD(1,1,I,I)
      SOMA2=(1./(1./D(I,J)+1./D(I,J+1)))*PROD(1,1,I,I)
      RLJ(J-1,J)=RLJ(J-1,J)+SOMA1
      RLJ(J+1,J)=RLJ(J+1,J)+SOMA2
8  CONTINUE
      RLJ(J+1,J)=RLJ(J+1,J)*DELY2
80  RLJ(J-1,J)=RLJ(J-1,J)*DELY2
      RLJ(2,1)=0.
      RLJ1=0.
      DO 2 I=1,NI
      SOMA2=(1./(1./D(I,1)+1./D(I,2)))*PROD(1,1,I,I)
      SOMA3=D(I,1)*PROD(1,1,I,I)
      RLJ(2,1)=RLJ(2,1)+SOMA2
2  RLJ1=RLJ1+SOMA3
      RLJ(2,1)=RLJ(2,1)*DELY2
      RLJ1=RLJ1*DELY2
C*****CODOMINIO 2 *****
      DO 84 J=NAI+1,NAF
      RLJ(J-1,J)=0.
      RLJ(J+1,J)=0.
      DO 85 I=1,NI
      PXA1=0.
      PXA2=0.
      DO 86 IA=1,2
      DO 86 IB=1,2
      SOMA1=PROD(IA,IB,I,I)*PRALF(IA,IB,J-1,J)
      SOMA2=PROD(IA,IB,I,I)*PRALF(IA,IB,J+1,J)
      PXA1=PXA1+SOMA1
      PXA2=PXA2+SOMA2
86  CONTINUE
      SOMA3=(1./(1./D(I,J)+1./D(I,J-1)))*PXA1
      SOMA4=(1./(1./D(I,J)+1./D(I,J+1)))*PXA2
      RLJ(J-1,J)=RLJ(J-1,J)+SOMA3
85  RLJ(J+1,J)=RLJ(J+1,J)+SOMA4
      RLJ(J-1,J)=RLJ(J-1,J)*DELY2
      RLJ(J+1,J)=RLJ(J+1,J)*DELY2
84  CONTINUE
C*****CODOMINIO 3 *****
      DO 81 J=NAF+1,N-1
      RLJ(J-1,J)=0.
      RLJ(J+1,J)=0.
      DO 82 I=1,NI
      SOMA1=(1./(1./D(I,J)+1./D(I,J-1)))*PROD(2,2,I,I)
```

```

SOMA2=(1./(1./D(I,J)+1./D(I,J+1)))*PROD(2,2,I,I)
RLJ(J-1,J)=RLJ(J-1,J)+SOMA1
82 RLJ(J+1,J)=RLJ(J+1,J)+SOMA2
RLJ(J-1,J)=RLJ(J-1,J)*DELY2
RLJ(J+1,J)=RLJ(J+1,J)*DELY2
81 CONTINUE
RLJ(N-1,N)=0.
RLJN=0.
DO 83 I=1,NI
SOMA1=(1./(1./D(I,N)+1./D(I,N-1)))*PROD(2,2,I,I)
SOMA4=D(I,N)*PROD(2,2,I,I)
RLJ(N-1,N)=RLJ(N-1,N)+SOMA1
RLJN=RLJN+SOMA4
83 CONTINUE
RLJ(N-1,N)=RLJ(N-1,N)*DELY2
RLJN=RLJN*DELY2
C*****TERMOS DE FUGA MEDIOS NA DIRECAO X *****
C*****CODOMINIO 1 *****
DO 9 J=1,NAI
RLT(J)=0.
DO 10 I=2,NI-1
PXA1=PROD(1,1,I,I)-PROD(1,1,I-1,I)
PXA2=PROD(1,1,I,I)-PROD(1,1,I+1,I)
SOMA1=(1./(1./D(I,J)+1./D(I-1,J)))*PXA1
SOMA2=(1./(1./D(I,J)+1./D(I+1,J)))*PXA2
10 RLT(J)=RLT(J)+SOMA1+SOMA2
PXA1=PROD(1,1,NI,NI)-PROD(1,1,NI-1,NI)
PXA2=PROD(1,1,1,1)-PROD(1,1,2,1)
SOMA1=(1./(1./D(NI,J)+1./D(NI-1,J)))*PXA1
SOMA2=(1./(1./D(1,J)+1./D(2,J)))*PXA2
SOMA4=PROD(1,1,NI,NI)*D(NI,J)
RLT(J)=RLT(J)+SOMA1+SOMA2+SOMA4
9 RLT(J)=RLT(J)*DELY2
C*****CODOMINIO 2 *****
DO 90 J=NAI+1,NAF
RLT(J)=0.
DO 91 I=2,NI-1
PXA1=0.
PXA2=0.
DO 92 IA=1,2
DO 92 IB=1,2
SOMA1=PRALF(IA,IB,J,J)*(PROD(IA,IB,1,I)-PROD(IB,IA,I-1,I))
SOMA2=PRALF(IA,IB,J,J)*(PROD(IA,IB,I,I)-PROD(IB,IA,I+1,I))
PXA1=PXA1+SOMA1
PXA2=PXA2+SOMA2
92 CONTINUE
SOMA1=(1./(1./D(I,J)+1./D(I-1,J)))*PXA1
SOMA2=(1./(1./D(I,J)+1./D(I+1,J)))*PXA2
91 RLT(J)=RLT(J)+SOMA1+SOMA2
PXA1=0.
PXA2=0.
PXA4=0.
DO 93 IA=1,2
DO 93 IB=1,2

```

```

SOMA1=PRALF(IA,IB,J,J)*(PROD(IA,IB,NI,NI)-PROD(IB,IA,NI-1,N
I))
SOMA2=PRALF(IA,IB,J,J)*(PROD(IA,IB,1,2)-PROD(IB,IA,2,1))
SOMA4=PRALF(IA,IB,J,J)*PROD(IA,IB,NI,NI)
PXA1=PXA1+SOMA1
PXA2=PXA2+SOMA2
93 PXA4=PXA4+SOMA4
SOMA1=(1./(1./D(NI,J)+1./D(NI-1,J)))*PXA1
SOMA2=(1./(1./D(1,J)+1./D(2,J)))*PXA2
SOMA4=D(NI,J)*PXA4
RLT(J)=(RLT(J)+SOMA1+SOMA2+SOMA4)*DELX2
93 CONTINUE
C*****CODOMINIO 3 *****
DO 94 J=NAF+1,N
RLT(J)=0.
DO 95 I=2,NI-1
PXA1=PROD(2,2,I,I)-PROD(2,2,I-1,I)
PXA2=PROD(2,2,I,I)-PROD(2,2,I+1,I)
SOMA1=(1./(1./D(I,J)+1./D(I-1,J)))*PXA1
SOMA2=(1./(1./D(I,J)+1./D(I+1,J)))*PXA2
95 RLT(J)=RLT(J)+SOMA1+SOMA2
PXA1=PROD(2,2,NI,NI)-PROD(2,2,NI-1,NI)
PXA2=PROD(2,2,1,1)-PROD(2,2,2,1)
SOMA1=(1./(1./D(NI,J)+1./D(NI-1,J)))*PXA1
SOMA2=(1./(1./D(1,J)+1./D(2,J)))*PXA2
SOMA4=PROD(2,2,NI,NI)*D(NI,J)
RLT(J)=(RLT(J)+SOMA1+SOMA2+SOMA4)*DELX2
94 CONTINUE
C*****CALCULO DO TERMO DE FUGA SOMADO EM X E EM Y *****
DO 23 J=2,N-1
23 RLT(J)=RLT(J)+SCAM(J)+RLJ(J-1,J)+RLJ(J+1,J)
RLT(1)=RLT(1)+SCAM(1)+RLJ1+RLJ(2,1)
RLT(N)=RLT(N)+SCAM(N)+RLJN+RLJ(N-1,N)
C*****MONTAGEM DA MATRIZ DE DESTRUICAO A *****
C*****ZERANDO A MATRIZ *****
DO 5 K=1,N
DO 5 J=1,N
5 A(K,J)=0.
C*****GERANDO OS TERMOS NAO NULOS *****
A(1,1)=RLT(1)
A(1,2)=-RLJ(2,1)
A(N,N-1)=-RLJ(N-1,N)
A(N,N)=RLT(N)
DO 3 J=2,N-1
A(J,J-1)=-RLJ(J-1,J)
A(J,J)=RLT(J)
A(J,J+1)=-RLJ(J+1,J)
3 CONTINUE
CALL UMD(A,C,S,F,SN,B,R,INT,XK,N)
DO 500 I=1,NI
DO 500 J=1,N
FLUXO(I,J)=(X(1,I)*ALFA(1,J)+X(2,I)*ALFA(2,J))*F(J)
500 CONTINUE
700 WRITE(6,701)

```

```

701 FORMAT(/,20X,'PARAMETROS MATERIAIS',10X,'MALHAS LIMITROFES'
,/)
WRITE(6,702)
702 FORMAT(/,12X,'REGIAO',2X,'SCA',6X,'D',8X,'SCF',9X,'EIXO X',
2X,'EIX
/ O Y',/)
WRITE(6,703)SCA1,C1,SCF1,NII,NN
703 FORMAT(/,15X,'1',4X,F5.3,4X,F5.3,4X,F6.4,6X,' 1',2X,I2,2X,'
1',2X,
/I2)
NA=NII+1
WRITE(6,704)SCA2,D2,SCF2,NA,NI,NN
704 FORMAT(/,15X,'2',4X,F5.3,4X,F5.3,4X,F6.4,6X,I2,2X,I2,2X,' 1
',2X,I2
/)
NAA=NN+1
WRITE(6,705)SCA3,D3,SCF3,NII,NAA,N
705 FORMAT(/,15X,'3',4X,F5.3,4X,F5.3,4X,F6.4,6X,' 1',2X,I2,2X,I
2,2X,I2
/)
WRITE(6,706)SCA4,D4,SCF4,NA,NI,NAA,N
706 FORMAT(/,15X,'4',4X,F5.3,4X,F5.3,4X,F6.4,6X,I2,2X,I2,2X,I2,
2X,I2,/
/)
WRITE(6,707)
707 FORMAT(/,20X,'DIMENSÃO DA MALHA',/)
WRITE(6,708)DELX
708 FORMAT(20X,'EM X',2X,F4.2,2X,'CM',/)
WRITE(6,709)DELY
709 FORMAT(20X,'EM Y',2X,F4.2,2X,'CM',/)
WRITE(6,110)
WRITE(6,111)
WRITE(6,112)XK,XCIT
WRITE(6,113)
ABSOL=ABS(XK-XCIT)
RELAT=ABSOL/XCIT
PERCT=RELAT*100
WRITE(6,114)ABSOL,RELAT,PERCT
110 FORMAT(/,20X,'COMPARAÇÃO COM RESULTADO DIF. FINITAS KEFF',/
)
111 FORMAT(/,10X,'KEFF DA SÍNTESE',10X,'KEFF DE DIF. FINITAS',/
)
112 FORMAT(10X,1PE12.5,12X,1PE12.5)
113 FORMAT(/,10X,'ERRO ABSOLUTO',5X,'ERRO RELATIVO',5X,'ERRO
/PERCENTUAL')
114 FORMAT(/,10X,1PE12.5,6X,1PE12.5,5X,1PE12.5//)
C*****IMPRESSÃO DOS FLUXOS*****
WRITE(6,602)
602 FORMAT(/,20X,'1',13X,'2',13X,'3',13X,'4',13X,'5',13X,'6',/)
DO 603 I=1,NI
WRITE(6,604)I,(FLUXO(I,J),J=1,6)
604 FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),/)
603 CONTINUE
WRITE(6,605)

```

```
605 FORMAT(/,20X,'7',13X,'8',13X,'9',12X,'10',12X,'11',12X,'12',  
//)  
DO 606 I=1,NI  
WRITE(6,607)I,(FLUXD(I,J),J=7,12)  
607 FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),//)  
606 CONTINUE  
WRITE(6,608)  
608 FORMAT(/,19X,'13',12X,'14',12X,'15',12X,'16',12X,'17',12X,'  
18',//)  
DO 609 I=1,NI  
WRITE(6,610)I,(FLUXD(I,J),J=13,18)  
610 FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),//)  
609 CONTINUE  
WRITE(6,620)  
620 FORMAT(/,19X,'19',12X,'20',12X,'21',12X,'22',12X,'23',12X,'  
24',//)  
DO 621 I=1,NI  
WRITE(6,622)I,(FLUXD(I,J),J=19,24)  
622 FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),//)  
621 CONTINUE  
WRITE(6,623)  
623 FORMAT(/,19X,'25',12X,'26',12X,'27',12X,'28',12X,'29',12X,'  
30',//)  
DO 624 I=1,NI  
WRITE(6,625)I,(FLUXD(I,J),J=25,30)  
625 FORMAT(/,4X,I2,9X,6(1PE10.3,5X),//)  
624 CONTINUE  
STOP  
END
```